



# Transition de phase et frustration en physique nucléaire et astrophysique

Karim Hasnaoui

## ► To cite this version:

Karim Hasnaoui. Transition de phase et frustration en physique nucléaire et astrophysique. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2008. Français. NNT: . tel-00337606

**HAL Id: tel-00337606**

**<https://theses.hal.science/tel-00337606>**

Submitted on 7 Nov 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



**GANIL T 08 02**

Grand Accélérateur National d'Ions Lourds

**GANIL**  
Laboratoire commun CEA / DSM - CNRS / IN<sup>2</sup>P<sup>3</sup>

## **UNIVERSITE de CAEN/BASSE-NORMANDIE**

U.F.R. des Sciences

ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

**THESE**

présentée par

**Mr Hasnaoui Karim**

et soutenue

**le 17 octobre 2008**

en vue de l'obtention du

**Doctorat de l'UNIVERSITÉ de CAEN**

Spécialité: Constituants élémentaires et physique théorique

**Arrêté du 07 Août 2006**

**Titre:**

**Transition de phase et frustration en physique nucléaire et astrophysique.**

### **Membres du Jury**

Mr **Philippe Chomaz**, Directeur de recherche CEA, GANIL (Directeur de thèse)

Mr **Michael Bender**, Directeur de recherche CNRS, CENBG (Rapporteur)

Mme **Francesca Gulminelli**, Professeur, Université de Caen/Basse-Normandie

Mr **Olivier Juillet**, Professeur, Université de Caen/Basse-Normandie

Mr **Jérôme Margueron**, Chargé de recherche CNRS, IPN d'Orsay

Mr. **Akira Ono**, Professeur, Université de Tohoku

Mme **Constança Providencia**, Professeur, Université de Coimbra

Mr **François Sebillé**, Professeur, Université de Nantes (Rapporteur)



# **UNIVERSITE de CAEN/BASSE-NORMANDIE**

U.F.R. des Sciences

ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

**THESE**

présentée par

**Mr Hasnaoui Karim**

et soutenue

**le 17 octobre 2008**

en vue de l'obtention du

**Doctorat de l'UNIVERSITÉ de CAEN**

Spécialité: Constituants élémentaires et physique théorique

**Arrêté du 07 Août 2006**

**Titre:**

**Transition de phase et frustration en physique nucléaire et astrophysique.**

## **Membres du Jury**

Mr **Philippe Chomaz**, Directeur de recherche CEA, GANIL (Directeur de thèse)

Mr **Michael Bender**, Directeur de recherche CNRS, CENBG (Rapporteur)

Mme **Francesca Gulminelli**, Professeur, Université de Caen/Basse-Normandie

Mr **Olivier Juillet**, Professeur, Université de Caen/Basse-Normandie

Mr **Jérôme Margueron**, Chargé de recherche CNRS, IPN d'Orsay

Mr. **Akira Ono**, Professeur, Université de Tohoku

Mme **Constança Providencia**, Professeur, Université de Coimbra

Mr **François Sebillé**, Professeur, Université de Nantes (Rapporteur)





"Je vais partager un petit secret avec vous. La course à pied fut à l'origine de ma force. Très tôt dans ma carrière, j'ai appris à courrir au-delà de la fatigue. Tant que je ne ressentais ni lassitude ni douleur, je considérai cela comme un simple échauffement. Il fallait que je dépasse mon seuil de tolérance pour que l'entraînement devienne profitable. C'est à ce moment-là que je mettais les bouchées doubles. Chaque kilomètre supplémentaire m'apportait un surcroît d'énergie. Ce qui fais la différence sur le ring, c'est ce dont on est capable une fois qu'on est fatigué. C'est la même chose dans la vie. Ne vous laissez pas arrêter par ceux qui abandonnent quand ils se sentent mal, par ceux qui se désespèrent facilement, par ceux que l'échec et l'injustice démoralisent, par ceux qui perdent de vue leur objectif. Si vous voulez gagner, votre volonté ne doit jamais fléchir, votre foi ne jamais faiblir. Vous ne devez jamais cesser de vous battre". Muhammad Ali



# Remerciements

Cette thèse a été financièrement assurée par la région Basse-Normandie et le CEA. Je remercie la direction du GANIL, Messieurs Sydney Galès, Marcel Jacquemet, Marek Lewitowicz, et Philippe Chomaz pour leur accueil au sein du laboratoire, et pour m'avoir permis de réaliser mon travail de thèse dans les meilleures conditions. Travailler au GANIL a été pour moi une chance inestimable et un véritable honneur.

Je tiens à remercier les membres de mon jury de thèse et à leurs témoigner ma reconnaissance, à commencer par mes rapporteurs François Sebillé et Michaël Bender que je remercie pour leur lecture minutieuse du manuscrit, et pour tout leur travail en tant que rapporteurs. J'ai souvent eu l'occasion d'interagir avec eux pendant ces trois dernières années, et nos discussions m'ont été très profitables lors de la réalisation de ce travail de thèse. Je remercie également Constança Providência et Akira Ono d'avoir fait le déplacement de ci-loin. La semaine de visite d'Akira au GANIL a été très riche en discussions remplies de perspectives : c'est avec beaucoup d'enthousiasme que je part réaliser mon Post-doc au sein de son groupe à l'Université de Tohoku. Un très grand merci à Jérôme Margueron pour sa présence le jour de ma soutenance, mais aussi pour ses nombreuses invitations aux meeting SNNS qui m'ont permis de mieux comprendre la physique des étoiles compactes. Je remercie également Olivier Juillet pour avoir accepté d'être le président du jury, ainsi que pour ses remarques concernant les applications du modèle FMD à la matière d'étoile.

J'aimerais exprimer toute ma gratitude à Philippe Chomaz et Francesca Gulminelli, mes encadrants de thèse, pour m'avoir accompagné et encadré pendant la réalisation de ce travail. J'ai beaucoup apprécié leur enthousiasme, leurs qualités scientifiques et humaines, leur rigueur, ainsi que leur ouverture d'esprit qui font d'eux des chercheurs exceptionnels. J'ai énormément appris avec eux deux, et leur aide dans de nombreux domaines m'a été d'un très grand secours. Ils ont été pour moi bien plus que des directeurs de thèse, je ne serai comment les en remercier, et exprimer ma reconnaissance. Travailler avec Philippe et Francesca a été un honneur et un véritable bonheur.

Travailler dans le groupe de Philippe et Francesca a été aussi pour moi l'occasion de collaborer avec d'autres physiciens qui sont devenus pour moi bien plus que des amis. Je tiens tout d'abord à remercier Camille pour les nombreuses discussions que nous avons eues ensemble, aussi bien des discussions de physique, que sur la vie en général (si un jour j'arrive à atteindre ton degré de précision, je crois que je serai le physicien le plus heureux du monde). Un grand merci à Paolo avec qui j'ai beaucoup travaillé sur le modèle Ising Star : ce sera avec un grand plaisir de continuer à collaborer avec toi dans l'avenir et à avoir ton regard d'experimentateur, tout en espérant que nous continuerons à regarder des films complètement loufoques... que malheureusement personne ne souhaite visionner avec nous. L'arrivée de Takuya au sein du groupe nous a fait énormément de bien. Son expertise en calcul AMD nous a été d'un très grand secours : travailler avec toi a été un honneur... j'apprécierai toujours ta façon originale d'aborder les problèmes qui doit être propre à l'école Japonaise. Enfin un très grand merci à Dean et Christian dont j'ai eu respectivement la chance d'encadrer et de co-encadrer leurs stages. Travailler avec vous deux a été une expérience très enrichissante aussi bien d'un point de vue professionnel qu'humain.

J'ai beaucoup appris avec vous deux sur la façon d'expliquer, de présenter et de voir les choses en physique théorique. J'ai eu beaucoup de chance d'encadrer des stagiaires aussi brillants, patients et sympatiques que vous deux. Je vous souhaite beaucoup de réussite dans la poursuite de vos études.

Un grand merci aux différents membres de l'équipe administrative du GANIL sans qui j'aurais été complètement noyé dans la bureaucratie c'est à dire Armelle, Chritine & Chritine (j'ai énormément rigolé avec vous trois, vous êtes comme des mères pour moi... vous allez beaucoup me manquer), Pascale, Sandrine, Sabrina L, Jacqueline, Isabelle la magnifique, Mélanie, Odile, Véronique (je tacherai de ne pas oublier ton paquet de Wasabi), Virginie dite la fée du SG, Jacques D, Marie-Laure, Stéphane J (votre aide venant de vous trois m'a été très précieuse lors de l'achat de la ferme de calcul), Sophie & Emilie (un accueil Ganilois irremplaçable), Antoine K dit Mister K, Michel & Thierry (un service de documentation irréprochable... des véritables Porsche surtout quand il s'agit de trouver dans la journée des articles quasiment introuvables).

Réaliser une thèse en physique théorique nécessite très souvent l'usage d'ordinateur... voir 24h/24h pendant plusieurs semaines, surtout si l'on a faire tourner un modèle FMD. J'ai énormément sollicité l'ensemble du service informatique du GANIL que je tiens à remercier ici et plus particulièrement Daniel V dit le philosophe, Grégoire, Guillaume L, Nicols M (merci à toi pour m'avoir aidé à négocier la ferme de calcul au meilleur prix), et Jean-Louis.

Un grand merci à tous les doctorants, post-doctorants et visiteurs avec qui j'ai partagé de bons moments de physique... et gastronomique c'est à dire Iulian & Jean-Baptiste (nos fameuses discussions de physique à la cafétéria Casino me manquent énormément), Josiane (sans toi je n'aurais jamais découvert les PhD comics), Marie (il est très difficile de trouver des gâteaux au chocolat aussi bons que les tiens), Anthony (j'ai beaucoup apprécié tes affiches compromettantes collées sur ma porte de bureau), Cyrille, Jean-Christophe, Laurent G et ses fameuses "questions aux théoriciens", Sugathan, Beatriz (ta plante a poussée de manière exponentielle dans le bureau), Thomas dit Sébastien ("Chuck Norris ne porte pas de montre... il décide de l'heure qu'il est!!!"), Cédric G, Carole, Florence, Antoine L dit le Linuxien (merci pour nos nombreuses discussions concernant les aspects informatiques), Bulent, Julien G (j'espère que l'on aura un jour l'occasion de monter un groupe de métal), Kouhei (merci à toi pour m'avoir aidé à organiser mon départ pour le Japon... qu'est-ce que j'aurais fais sans toi!!!), Pang, Praveen, Sakir, Salima notre rayon de soleil Algérien, Manuel dit Mister Maya ("ah ... jode!!! "), Eric B, Alexandre, Tarek, Mahmut, Juan, Isao (je n'ai toujours pas trouvé la solution à ton problème "avez-vous déjà vu l'interaction forte de vos propres yeux"), Xavier D (encore merci pour m'avoir corrigé mes nombreuses fautes d'AURTOGRAFE), Gérard L, Guillaume H (même si nous ne sommes pas restés très longtemps dans le même bureau, j'ai beaucoup apprécié ta gentillesse, et les discussions que nous avons pu avoir avec Denis), et Joe & Guilain (j'ai finalement trouvé des copains avec qui parler de football pendant les pauses déjeuner... malheureusement à la dernière minute!!!).

Je tiens également à remercier l'ensemble des physiciens permanents du GANIL et plus particulièrement Abdou, David, Denis L dit Denis la Malice, François, Gilles D, Jean-Pierre dit Barry Gibb (en te prêtant mes bouquins j'ai pu petit à petit stocker ma bibliothèque chez toi sans que tu t'en rende compte), John (encore merci pour m'avoir corrigé mes abstracts écrit en anglais), Marek P, Navin dit Joe l'Indien (nos discussions ainsi que tes fameux cours du mercredi soir m'ont énormément appris... "you have to think about it !!!"), Christelle, Olivier S dit le danseur de Tecktonik, Patricia (merci à toi et Philippe pour vos nombreuses invitations), Piet (ton aide nous a été précieuse pour l'obtention du projet ANR), Stéphane dit Mel Gibson ou Mad Max, et Chuck Norris le plan grand physicien de tout les temps bien loin devant Einstein & Co ("Si ça a le goût du poulet, l'odeur du poulet et que ça ressemble à du poulet, mais que Chuck Norris te dit que c'est du mouton, alors cherche pas, c'est du mouton !!!").

Pendant ma thèse j'ai été amené à faire de nombreux allers-retours au LPC... où je restais parfois bloqué. Cela n'empêchait pas de rencontrer des personnes aussi sympathiques qu'au GANIL. Je tiens à remercier un certain nombre de ces personnes qui m'ont toujours accueilli avec sourire, et avec qui j'ai eu souvent l'occasion de discuter de physique... et de gastronomie (déjà on passe son temps à manger en trois ans de thèse) c'est à dire Benoit L dit Ch'tio biloute (mon compatriote de l'Ch'nord!!!), Beyhan et les secoues volantes (au delà du réel... la vérité est ailleurs!!!), Lynda A & Anissa nos rayons de soleil Algérien version LPC, Bernard (encore merci pour avoir appuyé ma candidature lorsque je recherchais désespérément des vacances à l'université), Damien (au plaisir de se revoir sur Lyon et d'aller se visionner le graphique de Boskoff), Daniel C (c'est toujours un plaisir de venir mettre le bazar au LPC!!!), Dominique (Les Dominique Durant sur Facebook ont l'air très charmantes), Florian & Hicham (grâce à vous deux je ne restais jamais enfermé plus de 20 minutes au LPC lorsque je souhaitais sortir), Gilles B, Grégory, Jean-Luc dit l'incroyable Hulk, Jérémy, Marian, Miguel, Nigel, Olivier L (ah ah ah!!! les petits tritons!!!), et Remy dit le Tonton flingueur.

Au cours de ces trois années de thèse j'ai eu fréquemment l'opportunité de discuter avec des physiciens des autres laboratoires de l'In2p3, ainsi que de présenter mon travail dans différents workshop. Je tiens à remercier certains d'entre eux sans qui tout ceci n'aurait été possible c'est à dire Benoit & Cédric dit la TDHFB family, Taklit, Murielle, Sébastien F, Virginia, Patrick ("mince elles n'explosent toujours pas !!"), Elias (j'ai essayé de tenir compte de ton conseil "la chose qu'il ne faut absolument pas raté dans une thèse est le pot de soutenance"), Marchella, Eloïse, Karim & Thomas, Thomas D, Nicu, Xavier L dit le Neutronicien, et Bertram (c'est toujours un plaisir de t'avoir comme chef de session... jamais 5 sans 6!!!).

J'aimerais remercier un physicien qui m'a beaucoup aidé dans le passé. Dany Davesne est pour moi un exemple aussi bien en tant que chercheur, enseignant... et surtout en tant que coureur de fond. Tu as été un excellent professeur aussi bien pour la physique que pour la course à pieds. Je te dois beaucoup et j'espère que nous aurons l'occasion dans un avenir très proche d'avoir des projets de recherches en commun, ainsi que de recourir ensemble (nos nombreuses séances d'entraînement me manquent... je n'ai jamais su retrouvé un coureur de fond qui t'arrive à la cheville!!!).

J'ai eu la chance d'enseigner en tant que vacataire à l'Université de Caen, ainsi qu'à l'IUT de mesure physique. J'ai toujours considéré qu'enseigner était quelque chose de très important. J'y ai pris beaucoup de plaisir, c'est pourquoi je tiens à remercier Philippe M, Edgar, Natalia, Franck D, Gilbert, et Noëlle pour m'avoir aidé à préparer les enseignements et pour avoir fait en sorte que tout se passe très bien. Enseigner avec vous a été un privilège et un véritable bonheur.

Lorsque l'on pratique une activité de recherche, il arrive très souvent d'être en manque d'idées, ou de rester bloqué sur un problème que l'on arrive pas à résoudre. Il est souvent très utile de prendre du recul sur son travail et de se changer les idées. Ma philosophie a toujours été de faire de la course à pieds, de fréquenter des personnes différentes, ainsi que de m'intéresser à ce que les autres faisaient même si il ne s'agit pas de physique. En dehors ou à l'intérieur du laboratoire j'ai eu la chance de rencontrer des gens formidables avec qui j'ai partagé d'agréables moments. Je pense à Charles dit Charly le Breton (merci pour toutes les nombreuses séances cinés... tu es pour moi la définition même du cinéophile par excellence!!!), Franck dit Francky le magnifique (un système chaotique est ergodique... donc érotique), Pierre D dit l'Alsacien amateur de musique métal (au plaisir d'aller ensemble à d'autres concerts), Claire & Romuald (comme quoi les soirées spéciales célibataires lors de la Saint-Valentin marchent vraiment... je préfère quand même la méthode Chuck Norris dérivée du speed-dating où tu as 5 minutes pour me convaincre de ne pas te tuer!!!), Florie & Maël (encore merci pour les nombreuses sorties diverses et variées), Gaëlle P dite Gazou (malheureusement toutes les Gaëlle ne sont pas aussi gentilles et compréhensives que toi), Christelle dite Tetelle la Basco-Corse (au plaisir de te réciter mes futurs poèmes... et de te faire exploser de rire alors que tu bois ton Monaco), Séverine dite la Ch'timi imaginaire, Caroline L (ta gentillesse est légendaire!!!), Mansour le roi des couscous et pastillas parties, Lynda (ah ah ah!!! c'est ballot!!!), Marion & Clémentine (cela a été un véritable plaisir pour moi de vous enseigner la physique et les mathématiques, vous êtes les élèves que tout enseignant rêverai d'avoir, je vous souhaite plein de succès dans la poursuite de vos études), Marcela M (merci à toi et à Paolo pour votre invitation en Slovaquie lors de votre mariage, j'ai beaucoup aimé vos familles respectives... surtout l'oncle Palo et son incroyable tracteur), Tomoe (merci à toi pour m'avoir fais découvrir la gastronomie Japonaise), Marc L, Geraldine (j'espère ne pas t'avoir dégouté de la physique et des mathématiques), Jacques I dit le sauvage de la salle de muscu, Philippe G dit le champion du monde du vide toutes catégories confondues... et de l'écosystème Ganilois, Patrice L dit le syndicaliste, George dit le président (merci à toi pour tes nombreuses suggestions de films au Cabieux de Ouistream), et sans oublier mes compagnons de courses à pieds qui m'ont gentilleement invité ou véhiculé à des courses remplies de bon souvenirs c'est à dire Jacques C, Jean-François R, Laurent F & Laurent P (merci à vous deux pour m'avoir fait découvrir l'enfer normand lors du trail de l'Athis), Luc, Daniel O, Philippe B, Philippe L, et Matthieu dit Matmiche (notre participation au triathlon de Caen est l'un de mes meilleurs souvenirs).

Rentrer dans le Nord de la France était pour moi une seconde source de recul sur mon travail. Je tiens également à remercier la plupart de mes amis d'enfance qui m'ont toujours soutenu depuis le début de mes études... enfin pour la plupart depuis la première année de maternelle. C'est toujours un plaisir de vous retrouver. Merci à Benoit & Hélène... et le petit Jules (à chaque fois que je vous retrouve il y a quelque chose de nouveau... c'est pour quand le deuxième?), Caroline & Maxime (c'est pour quand le mariage?), Frederik & Angélique (en espérant te voir très prochainement institutrice), Emilia & Simon dit Sye le Hockeyeur (tu es comme un frère pour moi... j'ai très souvent la nostalgie du Roller Club Madelenois), Jean-François & Marie-José, Antoine R (j'espère que tu te débarrasseras très prochainement de ton cancer), Aymeric dit Tonton le Métalleu, Denis M dit l'As des As, Julien L, Justine dit Titine (Je te souhaite beaucoup de réussite... surtout pour l'obtention de ton agrégation de physique), Marc-Antoine dit Marcus, Nicolas L dit le Parigot, Nicolas T dit Iron Nycholson, et Sabrina D.

Enfin mes plus grands remerciements sont adressés à ma famille. Sans votre soutien, je n'aurait peut être pas pu réaliser ce travail de thèse. Merci à Maman, Papa, Rahma, Sabah et ma nièce Ines. J'ai beaucoup de chance de vous avoir, vous avez toujours su respecter et encourager mes choix depuis toujours. Après avoir fait sauter les plombs de la maison à plusieurs reprises au cours de mes nombreuses expériences lorsque j'étais plus jeune, j'ai compris grâce à vous qu'il serait peut être moins dangereux et moins risqué pour mon entourage de me reconverter dans une activité plus théorique. Encore merci pour tout!!! Je vous aime et je vous dédie ce manuscrit.





# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction.</b>	<b>5</b>
1.1	De la proto-étoile à l'étoile à neutrons. . . . .	5
1.2	Etude des transitions de phases de la matière d'étoile. . . . .	8
1.3	Résumé du travail présenté. . . . .	10
<b>2</b>	<b>Thermodynamique de la matière d'étoile.</b>	<b>13</b>
2.1	Introduction. . . . .	13
2.2	Le modèle Ising-Star. . . . .	14
2.2.1	Le modèle de gaz sur réseau dans un contexte astrophysique. . . . .	14
2.2.2	Implémentation de l'interaction nucléaire. . . . .	16
2.2.3	Implémentation de l'interaction Coulombienne. . . . .	16
2.2.4	Isomorphisme avec le modèle d'Ising. . . . .	18
2.2.5	Le modèle Ising Star à température finie. . . . .	20
2.3	Propriétés thermodynamiques de la matière d'étoile. . . . .	23
2.3.1	Diagramme des phases pour une matière neutre et une matière d'étoile chargée. . . . .	23
2.3.2	Étude de la criticité de la matière d'étoile. . . . .	24
2.4	Conclusions et perspectives. . . . .	29
<b>3</b>	<b>Groupe de renormalisation.</b>	<b>31</b>
3.1	Introduction. . . . .	31
3.2	Transformation générale du groupe de renormalisation. . . . .	32
3.3	Application de la TGR au cas du réseau triangulaire. . . . .	38
3.4	Application de la TGGR au modèle Ising Star. . . . .	41
3.5	Conclusion et perspectives. . . . .	42
<b>4</b>	<b>Le modèle FMD.</b>	<b>43</b>
4.1	Introduction. . . . .	43
4.2	Présentation du modèle FMD. . . . .	45
4.2.1	Principe variationnel dépendant du temps. . . . .	45
4.2.2	Choix des états à une particule et construction de la fonction d'onde globale du système. . . . .	47
4.2.3	Construction de l'opérateur densité à un corps et de ses dérivées. . . . .	49
4.2.4	Expression de la valeur moyenne d'une observable à un corps ainsi ses dérivées. . . . .	52
4.3	Connexion avec le modèle TDHF. . . . .	53
4.4	Implémentation de l'interaction nucléaire. . . . .	57
4.4.1	Introduction à la fonctionnelle de Skyrme. . . . .	57

4.4.2	Généralisation des observables à un corps quelconques. . . . .	61
4.4.3	Restauration de l'invariance Galiléenne. . . . .	64
4.4.4	Dérivation systématique du champ moyen. . . . .	68
4.5	Implémentation de l'interaction Coulombienne. . . . .	70
4.5.1	Calcul du terme direct. . . . .	70
4.5.2	Calcul du terme d'échange. . . . .	71
4.5.3	Effet de l'interaction Coulombienne sur les équations de mouvement. . . . .	71
4.6	Réalisation numérique. . . . .	72
4.6.1	Le modèle dynamique. . . . .	72
4.6.2	Le modèle statique. . . . .	87
4.7	Conclusion. . . . .	89
<b>5</b>	<b>Application du modèle FMD à la structure nucléaire.</b>	<b>91</b>
5.1	Introduction. . . . .	91
5.2	Implémentation de l'interaction Coulombienne. . . . .	92
5.2.1	Principe de la méthode. . . . .	92
5.2.2	Application numérique. . . . .	93
5.3	Etude des états fondamentaux de quelques noyaux. . . . .	95
5.4	Etude des résonances géantes monopolaires. . . . .	104
5.4.1	Introduction. . . . .	104
5.4.2	Principe de la méthode. . . . .	104
5.4.3	Applications numériques. . . . .	105
5.5	Conclusion. . . . .	114
<b>6</b>	<b>Thermodynamique des systèmes nucléaires finis.</b>	<b>117</b>
6.1	Introduction. . . . .	117
6.2	Ensemble statistique et choix du thermomètre nucléaire. . . . .	118
6.2.1	Principe de base. . . . .	118
6.2.2	Cas du système à deux niveaux : le spin $\frac{1}{2}$ . . . . .	120
6.2.3	Cas de l'oscillateur harmonique. . . . .	122
6.2.4	Connexion entre un spin J et l'oscillateur harmonique. . . . .	123
6.2.5	Résultats numériques. . . . .	125
6.3	Procédure systématique. . . . .	129
6.3.1	Choix du type de couplage entre le thermomètre et le fluide nucléaire. . . . .	129
6.4	Étude de l'ergodicité du système. . . . .	134
6.4.1	Introduction : Phénomènes ergodiques et chaotiques. . . . .	134
6.4.2	Section de Poincaré. . . . .	136
6.4.3	Spectre en fréquence. . . . .	137
6.4.4	Calcul de l'exposant de Lyapunov. . . . .	143
6.5	Etude thermodynamique du noyau d'hélium 4. . . . .	149
6.5.1	Calcul de la fonction d'autocorrelation. . . . .	149
6.5.2	Courbes caloriques du noyau d'hélium 4. . . . .	151
6.6	Conclusion. . . . .	157
<b>7</b>	<b>Application du modèle FMD à la matière d'étoile.</b>	<b>159</b>
7.1	Introduction. . . . .	159
7.2	Implémentation des conditions de Bloch. . . . .	160
7.2.1	Formalisme de base et ensembles statistiques. . . . .	160

7.2.2	Implémentation dans le cadre du modèle FMD. . . . .	163
7.3	Implémentation de l'interaction Coulombienne. . . . .	165
7.4	Conclusions. . . . .	167
<b>8</b>	<b>Conclusions et perspectives.</b>	<b>169</b>
<b>A</b>	<b>Elements de matrices et densités locales du modèle FMD.</b>	<b>171</b>
A.1	Etat à une particule et ses dérivées premières dans la représentation $ \vec{r}\rangle$ . . .	171
A.2	Matrice de recouvrement. . . . .	172
A.3	Dérivées premières des éléments de la matrice de recouvrement. . . . .	173
A.4	Dérivées secondes des éléments de la matrice de recouvrement. . . . .	174
A.5	Energie cinétique. . . . .	175
A.6	Oscillateur harmonique. . . . .	176
A.7	Piège en $\vec{r}^4$ . . . . .	177
A.8	Tenseur $A_{\mu\nu}$ . . . . .	178
A.9	Expressions des densités locales et de leurs dérivées. . . . .	179
A.9.1	Densité de particules. . . . .	179
A.9.2	Densité d'énergie cinétique. . . . .	180
A.9.3	Densité vectorielle $\vec{J}$ . . . . .	181



# Chapitre 1

## Introduction.

Le concept d'étoile à neutrons a vu le jour dans les années 20 grâce à L. Landau [1], tout de suite après la découverte du neutron par J. Chadwick. Depuis, la physique des étoiles et proto-étoiles à neutrons a connu d'énormes avancées [2, 3]. Il s'agit à l'heure actuelle d'un sujet extrêmement vaste à l'interface entre plusieurs disciplines telles que l'astrophysique, la physique nucléaire, et la matière condensée. En particulier l'étude des mécanismes de refroidissement des proto-étoiles vers les étoiles à neutrons est un domaine d'étude très complexe qui fait encore l'objet de nombreux travaux théoriques et observationnels. La structure interne de ces étoiles ainsi que les différentes phases de la matière nucléaire qui les constituent sont très débattues à l'heure actuelle. Une difficulté ultérieure à la description vient du fait que pour ces objets la structure est fortement couplée à des propriétés de transport. En effet la matière d'étoile est soumise à un processus complexe de compression, rebond et propagation de choc. Elle subit des mouvements collectifs et une dynamique de refroidissement sur des échelles de temps très différentes et avec un profil de densité complexe. Même à l'équilibre, nous savons aujourd'hui que les étoiles à neutrons peuvent être en rotation, subir des phénomènes d'accrétion dans les systèmes binaires, être le siège de champ magnétiques colossaux et de phénomènes violents d'éruption en surface. A la complexité des mécanismes en jeu s'ajoute le fait que nos connaissances empiriques sont encore insuffisantes et disparates. Le but principal de cette introduction est de donner une vue d'ensemble des différents phénomènes physiques qui tournent autour de la physique des étoiles à neutrons, et qui sont pertinents pour le travail de cette thèse. Nous décrirons tout d'abord qualitativement, l'ensemble des différentes étapes intermédiaires qui permettent la formation de la proto-étoile, ainsi que celles lui permettant d'atteindre l'étoile à neutrons. Nous évoquerons également l'un des majeurs problèmes irrésolus permettant la description du processus de refroidissement, tout en posant la problématique qui va nous intéresser. Nous terminerons en présentant d'une manière générale le travail réalisé au cours de cette thèse, dont le but n'est pas de donner une réponse définitive à chacune des questions posées, mais plutôt des éléments de réponse permettant d'évoluer dans la compréhension des problèmes tournant autour de cette physique.

### 1.1 De la proto-étoile à l'étoile à neutrons.

Le processus de formation des proto-étoiles à neutrons part des étoiles dont la masse est supérieur ou égale à approximativement huit fois la masse solaire. La stabilité de ces dernières est maintenue grâce à un équilibre hydrostatique caractérisé par la compétition

qui existe entre l'interaction gravitationnelle, et la pression induite par les réactions nucléaires au coeur de l'étoile. Lors de la fin de vie de ces étoiles, c'est à dire lorsqu'elles ont brûlé l'ensemble de leur stock d'hydrogène permettant la majorité des réactions nucléaires internes, il y a rupture de cet équilibre hydrostatique. L'interaction gravitationnelle ne pouvant plus être contrebalancée, l'étoile finit par s'effondrer sur elle-même en l'espace de quelques minutes. Lors de cette phase de collapse, la densité de matière de l'étoile passe environ de  $10^9$  à  $10^{14} \text{g/cm}^3$ , ce qui permet de re-hausser le niveau de Fermi de l'ensemble des constituants de l'étoile, et par conséquent qui induit des réactions de capture électronique. L'étoile va donc passer d'une matière nucléaire symétrique essentiellement constituée de noyaux de fer, à une étoile plus dense et plus riche en neutrons, dont la fraction protonique sera de l'ordre de  $1/3$ . Cet objet dense et chaud est caractérisé par une température atteignant et surpassant la vingtaine de MeV. En effet lors du collapse de l'étoile, la densité de matière est telle, que les neutrinos produits lors des réactions de captures électroniques restent entièrement piégés à l'intérieur de l'étoile, ce qui conduit à son réchauffement. Une fois cette étape terminée, il va y avoir une phase de rebond suivie par la propagation d'une onde de choc qui conduit à l'explosion de l'étoile, sous la forme d'un événement de supernovae de type II. A l'arrière du choc reste un noyau dense et chaud de matière : c'est la proto-étoile à neutrons. La formation de la supernovae est un processus au cours duquel il y a à la fois expulsion de l'atmosphère externe de la protoétoile, et une émission soudaine des neutrinos qui ont été piégés au cours de la phase de collapse. Une fois l'explosion terminée, la proto étoile va refroidir lentement pendant une durée de plusieurs années, au cours desquelles le refroidissement s'opère par émission progressive de neutrinos jusqu'à atteindre l'état d'étoile à neutrons qui est une étoile froide essentiellement constituée de neutrons avec un fraction protonique de l'ordre de 0.2, et dont la température est de l'ordre d'une dizaine de keV. La figure (1.1) est un schéma récapitulatif de l'ensemble du scénario.

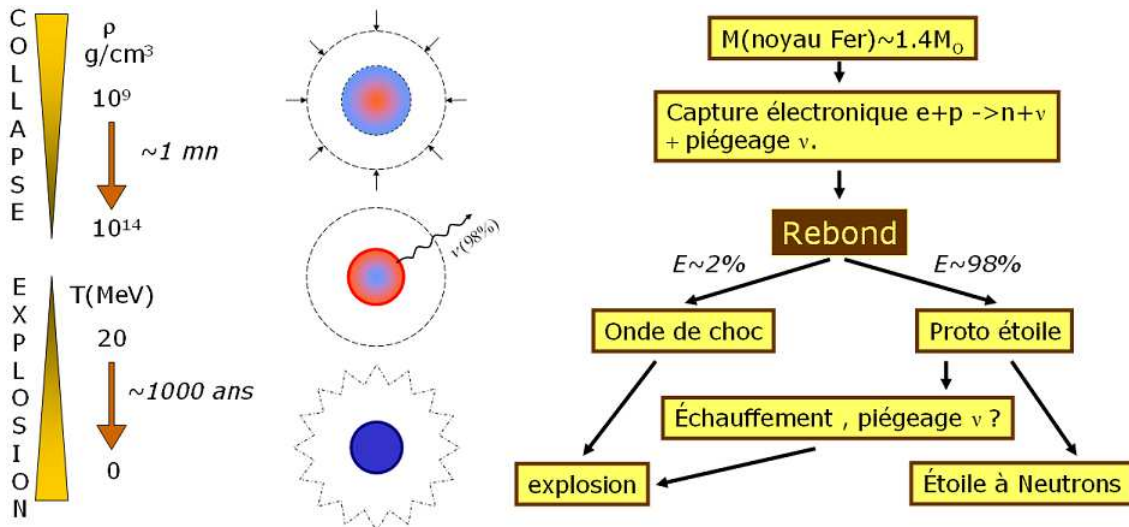


FIG. 1.1 – Schéma récapitulatif regroupant les différentes étapes de formation de la proto-étoile, en passant par la supernovae, jusqu'à l'étoile à neutrons.

La dynamique de ces différents processus est décrite par des modèles d'hydrodynamique. Ces modèles arrivent à l'heure actuelle à prédire le collapse, la phase de rebond, et la création de l'onde de choc [4, 5, 6]. Néanmoins la globalité des calculs théoriques montre que

cette onde de choc est résorbée assez rapidement [6], ce qui implique donc que l'ensemble des modèles sont dans l'incapacité de reproduire le mécanisme d'explosion, et par conséquent la formation de la supernovae. Lors du processus d'explosion, l'onde de choc représente une très faible proportion de l'énergie mise en jeu lors du collapse, et la majeure partie de celle-ci se trouve essentiellement gouvernée par les neutrinos. Seule une connaissance détaillée des probabilités d'interaction des neutrinos avec la matière permettra donc de comprendre quantitativement le phénomène d'explosion. L'une des possibilités proposée par J. Margueron *et al.* [7], serait d'avoir un piégeage complet des neutrinos dans l'écorce interne de la proto-étoile, lors de la phase d'expansion de l'onde de choc. Si l'on pouvait justifier d'un phénomène physique qui conduit pendant des temps courts à une forte opacité de la matière aux neutrinos, la pression exercée par les neutrinos pourrait donc contribuer à aider l'onde de choc à s'étendre, et reproduire le mécanisme d'explosion. C.J. Horowitz *et al.* [8, 9], et H. Sonoda *et al.* [10] ont réalisé des calculs de section efficace d'interaction des neutrinos avec la matière d'étoile présente dans l'écorce interne des protoétoiles. Ces travaux ont démontré que la probabilité de piéger les neutrinos augmente avec la dis-homogénéité de la matière. La section efficace d'interaction élastique  $\sigma(\vec{q})$  des neutrinos avec la matière d'étoile présente dans l'écorce est proportionnelle au facteur de forme  $S(\vec{q})$  :

$$\sigma(\vec{q}) \propto S(\vec{q}) \quad (1.1)$$

où le facteur de forme est défini par la transformée de Fourier de la fonction de corrélation :

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\vec{r} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \langle \rho(\vec{r})\rho(0) \rangle \quad (1.2)$$

Si l'on accroît les dis-homogénéités de la matière d'étoile de l'écorce, alors on aura une augmentation des corrélations, et donc de la section efficace d'interaction. La figure (1.2) résume les calculs de section efficace réalisés par C.J. Horowitz. Une possibilité intéressante d'avoir un piégeage complet des neutrinos sur de larges échelles, se vérifierait lors du passage par un point critique pendant le refroidissement de l'étoile. En effet, pour un phénomène critique la fonction de corrélation diverge, ce qui implique qu'il en sera de même pour le facteur de forme, et par conséquent pour la section efficace élastique d'interaction. Il apparaît donc important d'étudier les propriétés thermodynamiques de la matière d'étoile, et d'en extraire le diagramme des phases afin de déterminer si celui-ci présente des instabilités et/ou des points critiques. Le but de ce travail de thèse est d'apporter des informations sur la thermodynamique de la matière d'étoile, qui pourraient influencer sur le processus de refroidissement de la proto-étoile. Nous allons maintenant consacrer une partie plus détaillée sur la motivation de ce travail de thèse.



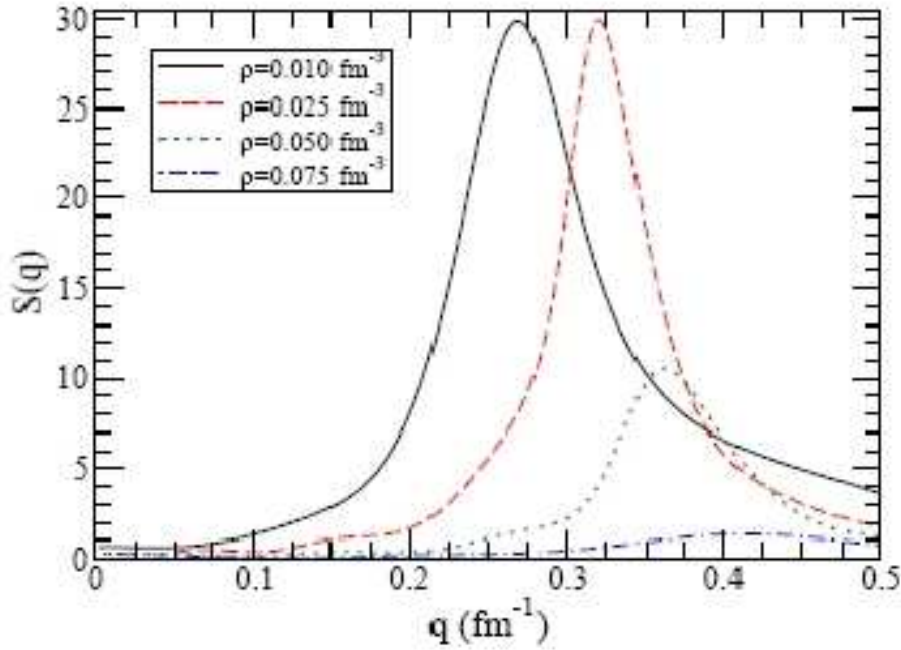


FIG. 1.2 – Fonction réponse de la matière d'étoile obtenue à l'aide de calcul de dynamique moléculaire classique [8]. Il est clairement montré que plus la matière d'étoile présentait des dis-homogénéités, plus la section efficace tendait à être importante.

## 1.2 Motivation : étude des transitions de phases de la matière d'étoile.

Les étoiles ( $T \sim 0 \text{ MeV}$ ) ou proto-étoiles ( $T > 0 \text{ MeV}$ ) à neutrons, sont des astres très denses dont le rayon mesure une dizaine de kilomètres, et dont la masse est de l'ordre d'une masse solaire. La solution de l'équation de Tolman-Oppenheimer-Volkoff [11, 12], qui correspond à l'équilibre statique d'un objet compact auto-gravitant, permet d'accéder au profil de densité de l'étoile. Ce profil dépend de façon essentielle de l'équation d'état de la matière. Du point de vue qualitatif, ce profil correspond à une densité qui peut fortement dépasser la densité de saturation  $\rho_0$  dans le centre de l'étoile, quand l'écorce est à densité  $\rho < \rho_0$ . Différentes phases de la matière nucléaire ont été prédites par de nombreux travaux théoriques [2, 3], et la figure (1.3) nous en donne un aperçu global. La coupe transverse nous montre que pour le coeur de l'étoile, dont la densité est de l'ordre de trois fois la densité  $\rho_0$ , une phase déconfinée de la matière nucléaire, le plasma de quarks et de gluons est prédite. Si on s'éloigne du coeur, on retrouve une matière nucléaire homogène à densités de l'ordre de  $\rho_0$  étendue sur plusieurs kilomètres, pour enfin atteindre l'écorce de l'étoile qui ne fait que quelques centaines de mètres, puis enfin l'atmosphère de l'étoile. Chacune de ces phases de la matière nucléaire constitue en elle-même un projet de recherche à part entière. La partie de l'étoile qui nous intéresse dans le cadre de ce travail est l'écorce, et c'est celle-ci qui fera l'objet de notre étude. Cette dernière est une matière constituée de neutrons, de protons, et d'un gaz d'électrons ultra-relativistes et dégénérés neutralisant la charge des protons [14]. Nous appellerons l'ensemble de ces constituants matière d'étoile. Bien qu'il s'agisse

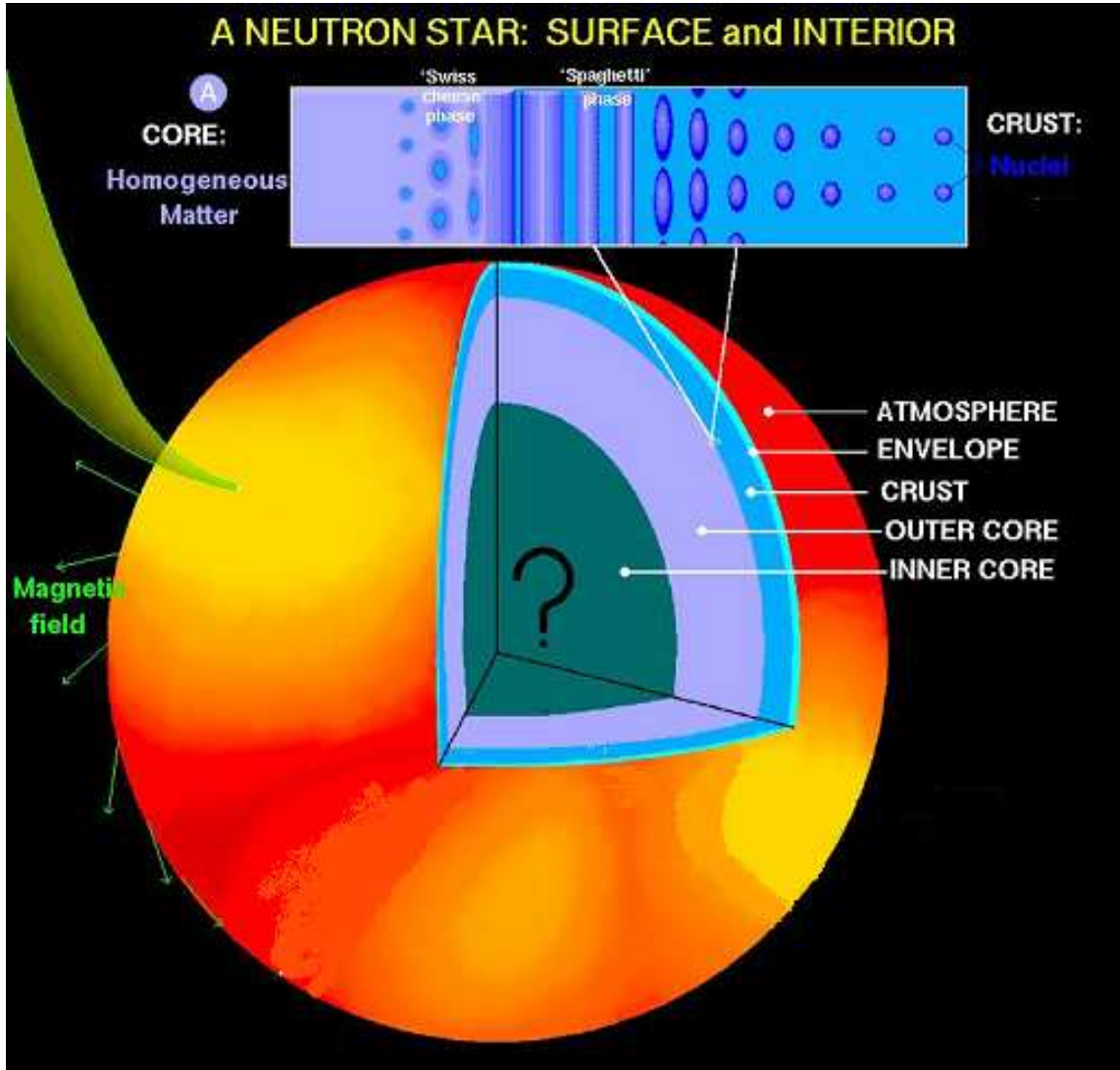


FIG. 1.3 – Figure représentant la coupe transverse de l'étoile à température nulle [13].

d'une matière très dense à l'échelle atomique, elle apparaît comme une matière relativement diluée d'un point de vue de la physique nucléaire, où la densité peut aller de  $\rho_0$  à  $1/100\rho_0$ . Ces faibles densités vont permettre la création de phases dishomogènes. J.C.Pethick et D.G. Ravenhall [15, 16, 17] ont effectué des premiers calculs de champs moyen de type Hartree-Fock pour la matière d'étoile à température nulle. Les résultats de ces travaux ont introduit l'idée de l'existence de phases exotiques dans l'écorce des étoiles, appelées phases "pasta" à cause de leurs structures géométriques. Le schéma (1.4), représente l'évolution en fonction de la densité de la matière nucléaire de l'écorce, qui présente progressivement des structures en forme de "gruyère", de "tubes", de "lasagnes", de "spaghetti", et de "bulles". L'existence de ces phases exotiques est due au phénomène de frustration engendré par la compétition entre l'interaction nucléaire et l'interaction Coulombienne, dont les intensités sont du même ordre de grandeur à ces basses densités. Néanmoins ces calculs ont été réalisés pour des températures nulles, et il sera intéressant d'explorer le diagramme des phases à des températures finies afin de vérifier si ces phases exotiques persistent. L'une des autres motivations est d'aller au delà du champ moyen afin d'inclure des corrélations.

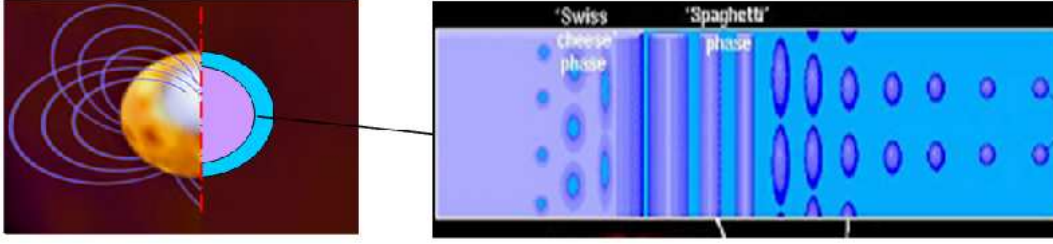


FIG. 1.4 – Schéma représentant la coupe transverse de l'écorce de l'étoile à température nulle. De la plus haute densité à la plus basse, on passe progressivement à des structures en forme de "gruyère", de "tubes", de "lasagnes", de "spaghetti", et de "bulles".

Plus récemment, d'autres approches plus sophistiquées basées sur la dynamique moléculaire ont été proposées par C.J. Horowitz et G. Watanabe [8, 18, 19], et elles ont confirmé l'existence des ces phases exotiques à très basses températures. Dans la plupart de ces approches, le diagramme des phases a été exploré dans une très faible portion, et les possibles implications de ces structures sur les propriétés observationnelles des étoiles restent presque entièrement à faire. La motivation principale de ce travail de thèse est d'explorer le diagramme des phases de la matière d'étoile, et d'essayer d'établir les connexions entre ces différentes phases exotiques. L'une des autres motivations importantes est d'étudier si cette matière d'étoile présente ou non un point critique. Nous montrerons que la frustration Coulombienne a une influence importante sur la thermodynamique de la matière d'étoile. Il faut également remarquer que les approches proposées par C.J. Horowitz et G. Watanabe sont des approches essentiellement classiques. Il serait donc intéressant de réaliser des calculs plus réalistes à l'aide d'approches fermioniques, et ceci afin de communiquer des données thermodynamiques quantitatives utiles aux calculs hydrodynamiques modélisant l'évolution de l'étoile.

### 1.3 Résumé du travail présenté.

Le travail de cette thèse porte sur l'étude thermodynamique de la matière d'étoile présente dans l'écorce des protoétoiles et étoiles à neutrons. Il se divise en deux parties, une première portant sur les approches classiques, et une seconde sur une approche quantique.

Le chapitre 2 concernant les approches classiques propose d'explorer le diagramme des phases à l'aide d'un modèle schématique de gaz sur réseau adapté au contexte astrophysique. Aucun ingrédient de physique nucléaire, ni de mécanique quantique n'a été inclus, mais la résolution de ce modèle est exacte, et il tient compte de l'ensemble des corrélations. Ce dernier va nous permettre d'obtenir des premières informations qualitatives sur la phénoménologie des transitions de phase pour la matière d'étoile. L'influence de la frustration Coulombienne est discutée, ainsi que les possibles impacts qu'elle pourrait avoir sur les mécanismes de refroidissement, et d'explosion de l'étoile. Il est notamment démontré au cours de cette partie que la matière d'étoile est caractérisée par une transition de phase de type liquide-gaz, et que l'influence de la frustration Coulombienne supprime tout phénomène critique au point limite de la transition du premier ordre. Un formalisme basé sur le groupe de renormalisation est ensuite développé au chapitre 3 pour les systèmes en interaction à longue portée. Ce dernier va être employé afin d'appuyer l'argumentation

développée à l'aide du modèle de gaz sur réseau. Il nous donnera également certains indices supplémentaires sur l'influence de l'interaction Coulombienne sur la phénoménologie des transitions de phase, et plus particulièrement celle que pourrait avoir la polarisation des électrons sur l'existence du point critique.

L'approche quantique est basée sur le modèle FMD. Ce dernier résout les équations de mouvement pour un système de fermions en interactions, où les états à une particule sont approximés comme étant des gaussiennes. Le chapitre 4 est consacré aux détails de la dérivation du formalisme déjà établi par H. Feldmeier [20, 21, 22], qui dans notre cas est reformulé dans un formalisme Skyrme Hartree-Fock. La résolution numérique des équations de mouvements est détaillée, et de nombreux tests numériques sont réalisés afin de le valider. Le chapitre 5 est ensuite consacré aux applications du modèle à la structure nucléaire, où des calculs d'états fondamentaux et de résonances géantes monopolaires sont réalisés pour quelques noyaux. Avant d'effectuer tout calcul de thermodynamique pour la matière d'étoile, le chapitre 6 se propose de commencer par un cas simple qui est celui des noyaux finis. L'implémentation d'un thermomètre nucléaire afin d'extraire la température du système nucléaire est discutée. Des tests d'ergodicité du système nucléaire sont également présentés. Finalement un premier aperçu du diagramme de phase est obtenu à partir des courbes caloriques. Un calcul exploratoire est présenté pour un noyau d'Hélium 4, et ceci avec différentes paramétrisations de l'interaction de Skyrme. Un calcul de courbe calorique est également réalisé avec l'interaction Coulombienne afin d'en tester l'influence de cette dernière sur la thermodynamique du noyau. Enfin le chapitre 7 propose une ébauche du formalisme qui permettra à terme de traiter numériquement le problème quantique de la matière infinie d'étoile à l'aide du modèle FMD.



# Chapitre 2

## Thermodynamique de la matière d'étoile à l'aide d'une approche Ising.

### 2.1 Introduction.

Depuis environ une trentaine d'années, de nombreux travaux théoriques ont permis de prédire que la matière nucléaire infinie en l'absence d'interaction Coulombienne est caractérisée par une transition de type liquide-gaz, de telle sorte que l'on pourra distinguer deux phases ainsi qu'une zone de coexistence. Cette zone de coexistence se termine par un point de transition du second ordre caractérisé par une divergence des longueurs de corrélation. Dans un tel point, le potentiel thermodynamique ainsi que ses dérivées premières sont continues, tandis qu'au moins l'une de ses dérivées secondes présente une discontinuité. On passe donc de façon continue d'une phase à l'autre sans que l'on puisse parler de coexistence des deux phases. La présence d'une transition de type liquide-gaz est due à la forme spécifique de l'interaction nucléon-nucléon. En effet l'interaction forte responsable de la cohésion nucléaire se manifeste par un potentiel à courte portée et à coeur dur. Pour cette raison, la matière nucléaire admet qualitativement la même phénoménologie que celle d'un fluide de Van-Der-Waals, et l'on pourra assimiler l'interaction nucléaire comme étant analogue à un potentiel de Lennard-Jones [23]. Du point de vue théorique, la transition liquide-gaz appartient à la classe d'universalité d'Ising, c'est à dire que l'on peut extraire les mêmes exposants critiques que ceux du modèle d'Ising. Si l'on cherche à modéliser de manière qualitative la phénoménologie des transitions de phases de la matière nucléaire, on pourra donc utiliser un modèle appartenant à la classe d'universalité d'Ising. Un excellent modèle permettant de réaliser ce genre d'études est le modèle de gaz sur réseau [24], isomorphe au modèle d'Ising. Ce modèle classique néglige l'aspect fermionique des nucléons, mais il est néanmoins un modèle très puissant. En effet, il permet de réaliser des calculs exacts à température finie au delà du champ moyen. La possibilité de réaliser des résolutions numériques exactes de la thermodynamique du modèle implique que les corrélations, ainsi que les fluctuations des différentes observables peuvent être entièrement prises en compte. Le modèle de gaz sur réseau est donc un très bon candidat si l'on souhaite étudier les signaux de transitions de phase de la matière nucléaire. Néanmoins afin d'obtenir une modélisation correcte de la phénoménologie des transitions de phases de la matière d'étoile, il nous sera nécessaire d'inclure un ingrédient essentiel qui est le Hamiltonien de frustration Coulombienne. Ce dernier devra tenir compte de l'interaction Coulombienne entre les différentes particules chargées constituant notre fluide nucléaire, et nous démontrerons que

son influence pourra modifier la physique de notre système. L'effet du champ Coulombien dans la thermodynamique des noyaux finis a été pris en compte dans de nombreuses études successives [25, 26, 27, 28, 29]. Il a été constaté que l'effet de la frustration Coulombienne avait tendance à modifier de manière significative la thermodynamique des noyaux. Cela se manifeste par un abaissement du point critique et une réduction de la zone de coexistence. Dans ce chapitre, nous développerons donc un modèle de gaz sur réseau adapté au contexte astrophysique, que nous appellerons le modèle "Ising-Star". Nous bâtirons dans un premier temps notre modèle, tout en détaillant la construction du Hamiltonien total du système dans le contexte astrophysique, et nous choisirons l'ensemble statistique dans lequel nous travaillerons. Ensuite nous étudierons les effets de la frustration Coulombienne en comparant nos résultats pour une matière d'étoile chargée à ceux pour une matière neutre. Nous illustrerons cette étude en exposant le diagramme de phases des deux systèmes. Enfin nous terminerons notre travail en effectuant des calculs de "finite size scaling" afin d'extraire des informations sur l'existence d'un point critique pour la matière d'étoile.

## 2.2 Le modèle Ising-Star.

### 2.2.1 Le modèle de gaz sur réseau dans un contexte astrophysique.

Les écorces des étoiles et proto-étoiles à neutrons sont essentiellement constituées de neutrons, de protons, et d'un gaz d'électrons ultrarelativiste dégénéré [14] neutralisant la charge des protons. Le modèle de gaz sur réseau que nous allons développer, devra tenir compte des différentes interactions existantes entre les particules constituant le fluide nucléaire dans ce contexte astrophysique. Il consiste à considérer un réseau cubique à trois dimensions de volume  $V = L^3$ . Chaque site  $i$  du réseau est caractérisé par son nombre d'occupation  $n_i$ . L'occupation est égale à 0 si le site est vide, ou égale à 1 si celui-ci est occupé. Etant donné que nous nous intéressons uniquement à l'influence de la frustration Coulombienne sur la phénoménologie des transitions de phases, nous négligerons les effets liés à l'isospin, et nous ne distinguerons donc pas les protons et les neutrons. La matière d'étoile étant un système infini, on peut définir les densités de charge protonique  $\rho_p = \frac{Z}{L^3}$  et baryonique  $\rho = \frac{A}{L^3}$  tel que chaque site sera ou non occupé par un quasi nucléon de charge  $q_p = ex$ , où  $e$  est la charge électronique, et  $x$  la fraction protonique avec  $x = \frac{\rho_p}{\rho} = \frac{Z}{A}$ . Nous supposons que le gaz d'électrons est distribué de manière homogène sur l'ensemble de la matière d'étoile [14, 18]. Par conséquent on peut répartir de manière uniforme la charge des électrons sur chacun des  $N$  sites du réseau, de tel sorte que  $q_e = -\frac{Ze}{N}$  sera la charge liée aux électrons sur chacun des sites du réseau. Chaque site  $i$  possédera alors une charge  $q_i = n_i - \frac{\sum_j n_j}{N}$  incluant la charge du nucléon ainsi que celle de la charge uniformément délocalisée des électrons. La neutralité en charge doit être strictement respectée sur toute portion macroscopique de la matière d'étoile [3], et ceci afin d'éviter une divergence de l'énergie Coulombienne. Globalement le réseau est neutre de charge tel que  $\sum_{i=1}^N q_i = 0$ , mais localement la charge peut fluctuer dans des sous-domaines du réseau. Il en découle que nous devons uniquement considérer l'interaction nucléaire entre les nucléons, et l'interaction Coulombienne nucléon-nucléon, électron-nucléon, et électron-électron. Le Hamiltonien total de notre système s'écrira sous la forme suivante :

$$H_{\text{Total}} = H_{\text{Cin}} + H_{\text{Int}} \quad (2.1)$$

où  $H_{\text{Cin}}$  est le Hamiltonien d'énergie cinétique et  $H_{\text{Int}}$  le Hamiltonien d'interaction, composé d'une partie nucléaire et d'une partie Coulombienne :

$$H_{\text{Int}} = H_n + H_C \quad (2.2)$$

Nous expliciterons par la suite plus en détail le Hamiltonien d'interaction. On peut donc écrire la fonction de partition total du système dans l'ensemble canonique :

$$Z_{\text{Total}} = \sum_{i=1}^N \sum_{n_i=0,1} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}^{BA} \exp(-\beta(E_{\text{Cin}} + E_{\text{Int}})) \quad (2.3)$$

où  $\beta$  est l'inverse de la température. Etant donné que le Hamiltonien d'énergie cinétique agit uniquement dans l'espace des impulsions et que le Hamiltonien d'interaction dans celui des positions, la fonction de partition total peut être factorisée comme un produit d'une fonction de partition contenant les informations liées à la dynamique de notre système et d'une autre contenant celles liées à l'interaction :

$$Z_{\text{Total}} = Z_{\text{Cin}} Z_{\text{Int}} \quad (2.4)$$

On peut ainsi donner l'expression de la valeur moyenne d'une observable  $\langle A_k \rangle_{\text{Total}}$  :

$$\begin{aligned} \langle A_k \rangle_{\text{Total}} &= - \frac{\partial \log(Z_{\text{Total}})}{\partial \lambda_k} \\ &= - \frac{\partial \log(Z_{\text{Cin}})}{\partial \lambda_k} - \frac{\partial \log(Z_{\text{Int}})}{\partial \lambda_k} \\ &= \langle A_k \rangle_{\text{Cin}} + \langle A_k \rangle_{\text{Int}} \end{aligned} \quad (2.5)$$

où  $\lambda_k$  est le paramètre de Lagrange associé à l'observable. La fonction de partition correspondant à la partie cinétique peut être à son tour factorisée, car elle ne contient aucun terme de couplage entre les nucléons et les électrons :

$$Z_{\text{Cin}} = Z_{\text{Cin}}^n Z_{\text{Cin}}^{e-} \quad (2.6)$$

ce qui se traduit par l'additivité des dérivées des logarithmes des fonctions de partitions si l'on cherche à connaître la valeur moyenne de l'observable  $\langle A_k \rangle_{\text{Cin}}$  tel que :

$$\begin{aligned} \langle A_k \rangle_{\text{Cin}} &= - \frac{\partial \log(Z_{\text{Cin}})}{\partial \lambda_k} \\ &= - \frac{\partial \log(Z_{\text{Cin}}^n)}{\partial \lambda_k} - \frac{\partial \log(Z_{\text{Cin}}^{e-})}{\partial \lambda_k} \\ &= \langle A_k \rangle_{\text{Cin}}^n + \langle A_k \rangle_{\text{Cin}}^{e-} \end{aligned} \quad (2.7)$$

On remarque que la partie cinétique contribue uniquement à ajouter un terme qui correspond exactement à la phénoménologie du gaz parfait pour les nucléons et celle d'un gaz de fermion ultrarelativiste et dégénéré pour les électrons. La thermodynamique de ces deux gaz libres étant bien connue, la fonction de partition associée ne présente pas de non-analyticité et n'a pas d'influence sur la phénoménologie des transitions de phases. Nous pouvons donc nous affranchir du Hamiltonien d'énergie cinétique. Etant exclusivement intéressés par les transitions de phases de la matière d'étoile, nous nous limiterons par la suite à prendre en compte uniquement le Hamiltonien d'interaction, comme étant égal au Hamiltonien total. Nous allons maintenant nous consacrer à la construction des Hamiltoniens d'interaction nucléaire et Coulombienne.



### 2.2.2 Implémentation de l'interaction nucléaire.

Comme nous l'avons énoncé lors de l'introduction de ce chapitre, l'interaction nucléaire est une interaction de courte portée à coeur dur qui est associée à un système appartenant à la classe d'universalité d'Ising. Si l'on est uniquement intéressé aux propriétés critiques de la matière d'étoile, elle peut être approximée à l'aide du Hamiltonien d'Ising tel que :

$$H_n = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (2.8)$$

où la somme porte sur les plus proches voisins, tout en respectant les conditions aux limites périodiques afin de s'affranchir des effets de bords de la boîte. Si le réseau est suffisamment étendu, on reproduira ainsi avec une bonne approximation un bloc de matière nucléaire infinie. La constante d'interaction nucléaire  $\epsilon$  peut être choisie de telle sorte à reproduire les ordres de grandeur pour les énergies, qui sont comparables à ceux de la physique nucléaire. En considérant que lorsque tous les  $N$  sites du réseau sont occupés, on doit retrouver l'énergie de saturation de la matière nucléaire :

$$-\frac{\epsilon}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} = -3\epsilon = -16.5 \text{ MeV} \quad (2.9)$$

Ceci impose pour l'ensemble de nos calculs la valeur  $\epsilon = 5.5 \text{ MeV}$ .

### 2.2.3 Implémentation de l'interaction Coulombienne.

L'implémentation de l'interaction Coulombienne dans le cadre de notre modèle est assez délicate. En effet le principe de base est d'utiliser un réseau de taille finie, alors que la matière d'étoile que nous souhaitons modéliser est infinie, et l'interaction Coulombienne entre les particules chargées est de portée infinie. L'implémentation de l'interaction Coulombienne dans le modèle Ising-Star, consiste dans un premier temps à répliquer de manière uniforme le réseau selon les trois directions de l'espace afin de reproduire une matière nucléaire infinie, et ensuite à calculer toutes les interactions possibles entre les particules la constituant. Notre technique est équivalente à la méthode de sommation d'Ewald couramment utilisée en physique de la matière condensée [30, 31]. Si l'on réplique le réseau principal  $M$  fois, on peut écrire simplement l'expression de l'énergie d'interaction Coulombienne par réseau :

$$H_C = \frac{\kappa}{2M} \sum_{i \neq j}^{NM} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (2.10)$$

où  $\kappa = \alpha \hbar c \rho_0^{1/3} x^2$  est la constante d'interaction Coulombienne dépendant de la fraction protonique  $x$  et de la densité de saturation nucléaire  $\rho_0$ . La densité de saturation est ici imposée afin de fixer le pas du réseau de telle sorte à retrouver les propriétés de saturation de la matière nucléaire lorsque le réseau est entièrement rempli. En choisissant  $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$  la distance entre deux sites proches voisins sera donnée par  $r_0 = \rho_0^{-1/3} = 1.842 \text{ fm}$ . Sachant que l'on a utilisé l'approximation de réseaux répliqués et identiques, il en sera de même pour chacune des charges constituant les réseaux répliqués tel que :

$$q_i = q_{i+\vec{n}L} \quad (2.11)$$

On peut ainsi approximer l'équation (2.10) par :

$$H_C \approx \frac{\kappa}{2M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{n}}^M \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|} \quad (2.12)$$

et l'on peut schématiquement représenter le modèle par la figure suivante :

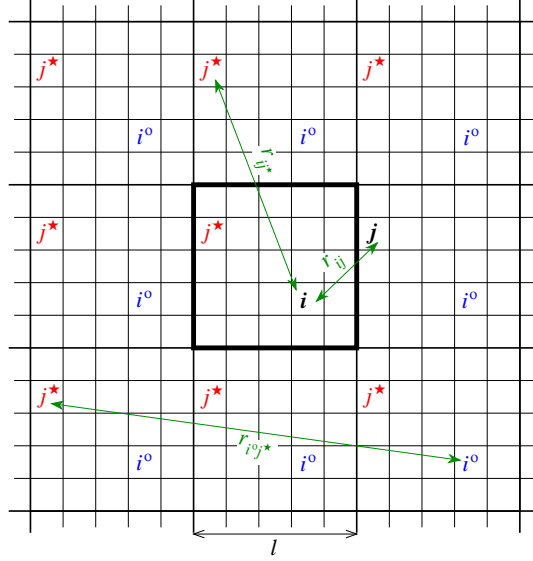


FIG. 2.1 – Représentation schématique du réseau principal uniformément répliqué dans l'espace à deux dimensions où  $i^0 = i + \vec{n}L$  et  $j^* = j + \vec{n}L$ .

L'expression du Hamiltonien d'interaction Coulombienne (2.12) nécessite d'être manipulée, afin d'effectuer des calculs numériques. On peut la ré-écrire comme un produit des nombres d'occupations par un élément de matrice où :

$$H_C = \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N n_i n_j C_{ij} \quad (2.13)$$

Les éléments de matrices  $C_{ij}$  représentent un potentiel d'interaction Coulombienne renormalisé entre deux nucléons du réseau, et ils seront tabulés une fois pour toutes avant tout calcul Monte-Carlo. Ils tiennent compte de l'écrantage du aux interactions avec les électrons, ainsi que celles existantes avec les particules appartenant aux réseaux répliqués. Le potentiel d'interaction Coulombienne renormalisé est donné par :

$$C_{ij} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{\vec{n}}^M \left( \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|} - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left( \frac{1}{|\vec{r}_{ik} + \vec{n}L|} + \frac{1}{|\vec{r}_{jk} + \vec{n}L|} \right) + \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{kl} + \vec{n}L|} \right) \quad (2.14)$$

où le premier terme traduit l'interaction Coulombienne entre les nucléons, le second celle entre les nucléons et les électrons, et le dernier celle entre les électrons. La somme sur  $\vec{n}$  spécifie que l'on réplique  $M$  fois le réseau uniformément selon les trois directions de l'espace. Nous avons démontré [32] à l'aide de développements multipolaires, que pour une distance  $r_{ij}$  donnée, la constante d'interaction converge très vite vers une valeur finie. Une dizaine

de répliques dans chacune des trois directions de l'espace suffit amplement afin d'obtenir une excellente convergence et ceci pour des boîtes ayant un volume supérieur ou égale à  $N = 5^3$ . On peut également remarquer que ces éléments de matrice sont symétriques :

$$C_{ij} = C_{ji} \quad (2.15)$$

et que si l'ensemble du réseau est entièrement occupé, chaque nucléon verra sa propre charge écrantée par celle de la charge électronique répartie sur le même site. Dans ce cas d'occupation complète, localement on aura sur chacun des sites  $i$  du réseau une charge nulle, ainsi qu'une suppression globale de l'interaction Coulombienne qui se reflète par une autre propriété des éléments de matrices  $C_{ij}$  où :

$$\sum_{i=1}^N C_{ij} = 0 \quad (2.16)$$

qui traduit la neutralité globale du système. La condition de périodicité doit être également respectée afin de s'affranchir des effets de bords de la boîte. On peut réécrire la constante de couplage  $C_{ij}$  sous une forme plus compacte [32] :

$$C_{ij} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{\vec{n}} \left( \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^*} - \frac{1}{N} \sum_{k \neq 0}^N \frac{1}{|\vec{r}_{0k} + \vec{n}L|^*} \right) \quad (2.17)$$

où l'astérisque indique que le réseau a la topologie d'un réseau à bords périodiques. Ceci correspond à redéfinir la selon la condition suivante :

$$\Delta x_{ij} = \text{Min}(|x_{ij}|, L - |x_{ij}|) \quad (2.18)$$

pour chaque direction de l'espace. La distance totale s'écrit :

$$r_{ij} = \sqrt{\Delta x_{ij}^2 + \Delta y_{ij}^2 + \Delta z_{ij}^2} \quad (2.19)$$

Nous pouvons observer que la propriété d'invariance par translation et respectée avec la définition (2.19) : l'interaction Coulombienne entre deux sites ne dépend que de la distance qui les sépare.

En traçant le potentiel Coulombien renormalisé (2.2.3), on peut constater qu'il a une forme quasi en  $1/r$ . Le terme d'auto-interaction pour les distances nulles est physique, et provient de l'interaction d'une particule avec ses propres répliques. Notre méthode permettrait une implémentation exacte de l'interaction Coulombienne pour la matière d'étoile tout en s'affranchissant des effets de bords du réseau, si la distribution de la matière était véritablement périodique. Ceci reste évidemment une approximation dans le sens où la longueur de corrélation sera restreinte par la dimension linéaire du réseau. Nous reviendrons sur cette approximation à la fin du chapitre. Après avoir formulé les expressions des Hamiltoniens d'interaction nucléaire et Coulombienne, nous allons maintenant étudier les relations d'équivalence entre le modèle d'Ising et le modèle Ising-Star.

#### 2.2.4 Isomorphisme avec le modèle d'Ising.

Une des propriétés remarquables du modèle de gaz sur réseau, et plus particulièrement celle de notre modèle dans ce contexte astrophysique, est celle d'isomorphisme avec le

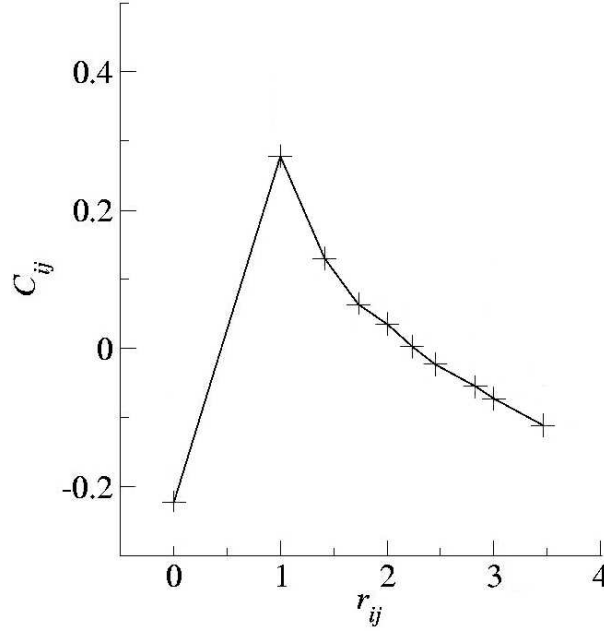


FIG. 2.2 – Représentation de la matrice  $C_{ij}$  calculée pour 10 répliques, en fonction des distances discrètes  $r_{ij}$  accessibles sur un réseau  $V = 5^3$ .

modèle d'Ising. En effet on peut retraduire la variable nombre d'occupation  $n_i$  d'un site  $i$  donné en terme de spin  $s_i = \pm \frac{1}{2}$  où la connexion entre ces deux variable est simplement donnée par :

$$n_i = s_i + \frac{1}{2} \quad (2.20)$$

On aura donc une orientation "up" du spin si le site est occupé, et une orientation "down" si celui-ci est vide. On peut ainsi récrire l'ensemble des observables de notre système dans l'espace des spins. Une des quantité les plus intéressantes à regarder dans cet espace, est la quantité  $H_{\text{Total}} - \mu A$ , qui va nous donner la valeur du potentiel chimique  $\mu$  à imposer si l'on souhaite étudier la criticité du système. En utilisant les propriétés des éléments de matrice  $C_{ij}$  régis par les équations (2.15) et (2.16), on peut la réécrire tel que :

$$H_{\text{Total}} - \mu A = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{ij} s_i s_j - (3\epsilon + \mu) \sum_{i=1}^N s_i - \frac{N}{2} \left( \frac{3}{2}\epsilon + \mu \right) \quad (2.21)$$

et par identification, notre modèle est équivalent à un système magnétique en interaction à courte et longue portée, soumis à un champ magnétique externe  $B = (3\epsilon + \mu)$ . On peut réexprimer l'équation précédente comme :

$$H_{\text{Total}} - \mu A = H_{\text{Ising}} + H_{\text{Coul}} - B \cdot \mathcal{M} + \mathcal{C} \quad (2.22)$$

où  $\mathcal{M} = \sum_{i=1}^N s_i$  est l'aimantation du système, et  $\mathcal{C}$  une constante. Le modèle d'Ising a pour paramètre d'ordre l'aimantation  $\mathcal{M}$  qui doit s'annuler au point critique. L'isomorphisme (2.21) montre que pour le modèle de gaz sur réseau, le paramètre d'ordre est la densité  $\rho = (\mathcal{M}/N + 1/2)$ . Si l'on souhaite étudier la possibilité d'avoir un point critique avec le modèle Ising-Star, il faudra travailler en champ magnétique externe nul (ou en fixant

$\rho = 1/2$ ), c'est à dire que notre potentiel chimique critique devra respecter la relation  $\mu_c = -3\epsilon$ .

Le modèle Ising-Star peut être connecté au modèle ferromagnétique frustré par un terme d'interaction Coulombienne [33, 34], et qui est décrit par le Hamiltonien suivant :

$$H_{\text{Fe}} = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \frac{\kappa}{2M} \sum_{i \neq j}^{NM} \frac{s_i s_j}{r_{ij}} \quad (2.23)$$

En imposant la condition  $\mu = \mu_c$ , la liaison entre les deux modèles est donnée par :

$$H_{\text{Total}} - \mu_c A = H_{\text{Fe}} - \frac{\kappa}{2\bar{r}} \mathcal{M}^2 + N \frac{3\epsilon}{4} \quad (2.24)$$

où

$$\frac{1}{\bar{r}} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{N} \sum_{k \neq 0}^N \frac{1}{|\vec{r}_{0k} + \vec{n}L|^*} \quad (2.25)$$

Dans le cas où l'on ne considère qu'une interaction entre proche voisins, l'isomorphisme entre le modèle de gaz sur réseau dans l'ensemble grand canonique et le modèle d'Ising est parfaitement respecté [24]. Si l'on revient au cas des systèmes chargés donnée par l'équation (2.24), on remarque que l'isomorphisme entre le modèle Ising-Star et le modèle ferromagnétique frustré est uniquement respecté si l'on impose la contrainte  $\mathcal{M} = 0$ . Cette contrainte ne correspond pas à la thermodynamique de l'écorce de la proto-étoile, car cette dernière est décrite pour des très faibles densités telles que typiquement  $\rho < 1/2$ , c'est à dire pour une aimantation préférentiellement négative. Toute fois si l'on travaille dans l'ensemble grand-canonique on obtiendra toute une distribution de  $\mathcal{M}$ , et on pourra par échantillonnage considérer la réponse physique qui nous intéresse. Finalement il faut remarquer que la présence du terme non-linéaire  $\mathcal{M}^2$  va affecter directement la courbure de la distribution du paramètre d'ordre, et donc modifier les propriétés des phases du modèle Ising-Star qui est défini pour tout  $\mathcal{M}$  par rapport au modèle ferromagnétique frustré qui n'est défini que pour  $\mathcal{M} = 0$ . En effet il est bien connu que le fait d'imposer une contrainte sur le paramètre d'ordre peut modifier statistiquement la thermodynamique du système [35], et donc a priori nous nous attendons pas dans le modèle Ising-Star à retrouver le même diagramme de phase que dans les travaux des références [33, 34].

## 2.2.5 Le modèle Ising Star à température finie.

### L'ensemble multi-grand-canonique.

L'ensemble statistique dans lequel nous allons effectuer nos calculs doit être judicieusement choisi, et tout particulièrement si l'on souhaite remonter à l'intégralité du diagramme des phases de la matière d'étoile. La meilleure possibilité est d'obtenir des spectres en densité à différentes températures. L'ensemble statistique permettant de procéder à ce genre d'étude est l'ensemble grand canonique, où la probabilité d'avoir un état microscopique  $(n)$  donné est définie par :

$$P^{(n)}(\beta, \mu, E^{(n)}, A^{(n)}, V) = \frac{\exp(-\beta(E^{(n)} - \mu A^{(n)}))}{Z(\beta, \mu, V)} \quad (2.26)$$

où

$$Z(\beta, \mu) = \int W(E, A, V) \exp(-\beta(E - \mu A)) dE dA \quad (2.27)$$

où  $E$  et  $A = \sum_{i=1}^N n_i$  étant respectivement l'énergie et le nombre de nucléons définissant l'état microscopique,  $W(E, A, V)$  la densité des états, et  $Z(\beta, \mu)$  la grande fonction de partition du système. Si l'on cherche à étudier l'influence de la frustration Coulombienne sur la thermodynamique de la matière d'étoile, on peut étendre l'ensemble grand-canonique vers l'ensemble "multi-grand-canonique" [24, 27]. Le principe de base est d'attribuer à chacune des deux observables  $E_n$  et  $E_C$ , les paramètres de Lagrange  $\beta_n$  et  $\beta_C$  qui leur seront respectivement associés. On peut ainsi réécrire la probabilité dans cet ensemble telle que :

$$P^{(n)}(\beta_n, \beta_C, \mu, E_n^{(n)}, E_C^{(n)}, A^{(n)}) = \frac{\exp\left(-\beta_n(E_n^{(n)} - \mu A^{(n)}) - \beta_C E_C^{(n)}\right)}{Z(\beta_n, \beta_C, \mu)} \quad (2.28)$$

où

$$Z(\beta_n, \beta_C, \mu) = \int W(E_n, E_C, A, V) \exp(-\beta_n(E_n - \mu A) - \beta_C E_C) dE_n dE_C dA \quad (2.29)$$

En faisant varier ces deux paramètres de Lagrange, on teste indépendamment l'intensité de chacune des deux interactions sur la thermodynamique de notre système. En ce qui concerne l'interaction Coulombienne, l'ensemble des calculs va être effectué à fraction protonique constante  $x = 1/3$ , ce qui constitue une valeur typique pour les proto-étoiles à neutrons. Néanmoins lors du processus d'évolution de la proto-étoile, la fraction protonique est un paramètre dynamique qui évolue en fonction du temps. Le fait de faire varier le paramètre de Lagrange  $\beta_C$  est équivalente à faire varier la fraction protonique, car l'on peut redéfinir à tout moment un nouveau paramètre de Lagrange  $\beta'_C = x\beta_C$ . La modification du paramètre de Lagrange associé à l'interaction Coulombienne est donc une mesure de la variation de la fraction protonique. On peut remarquer que lorsque l'on contraint la condition  $\beta_n = \beta_C$ , on retrouve l'ensemble grand canonique usuel pour la fraction protonique standard imposée à  $x = 1/3$ . Il en est de même lorsque l'on impose  $\beta_C = 0$ . Le cas de la matière nucléaire ordinaire (non chargée) est examiné par cette dernière condition.

### Réalisation numérique du modèle : l'algorithme de Metropolis.

Afin de générer correctement l'ensemble des événements constituant l'ensemble statistique, l'ensemble des différentes configurations du modèle de gaz sur réseau sont obtenues par des calculs de type Monte-Carlo. L'algorithme utilisé est celui de Metropolis [36]. Le principe de la méthode est de partir d'une configuration (1) donnée. Ensuite nous sélectionnons aléatoirement un site  $i$  du réseau, et on lui change son nombre d'occupation. On obtient ainsi une nouvelle configuration (2) où les variations de l'énergie totale et du nombre de particules par rapport à la configuration (1) seront données par :

$$\Delta E_{\text{Total}}^{(1,2)} = E_{\text{Total}}^{(2)} - E_{\text{Total}}^{(1)} \quad (2.30)$$

$$\Delta A^{(1,2)} = A^{(2)} - A^{(1)} \quad (2.31)$$

Dans le cas où la variation de la quantité  $\Delta E_{\text{Total}}^{(1,2)} - \mu \Delta A^{(1,2)}$  est négative, la configuration (2) sera conservée. Dans le cas contraire, on calculera le rapport des probabilités des deux

micro états  $\lambda^{(1,2)} = \frac{P^{(2)}}{P^{(1)}}$ , que l'on comparera à un nombre aléatoire tiré entre 0 et 1. Si  $\lambda^{(1,2)}$  est supérieur à ce nombre, alors la configuration (2) sera conservée, et rejetée dans le cas contraire. On peut donc exprimer les deux quantités qui nous intéressent, c'est à dire la variation de l'énergie totale lorsque l'on passe de la configuration (1) à la configuration (2) :

$$\Delta E_{\text{Total}}^{(1,2)} = \Delta E_n^{(1,2)} + \Delta E_C^{(1,2)} \quad (2.32)$$

ainsi que le rapport des probabilités :

$$\lambda^{(1,2)} = \exp \left( -\beta_n (\Delta E_n^{(1,2)} - \Delta A^{(1,2)}) - \beta_C \Delta E_C^{(1,2)} \right) \quad (2.33)$$

La variation du nombre de particules du réseau est égale à la variation du nombre d'occupation du site  $i$  que l'on a aléatoirement choisi sur le réseau :

$$\Delta A^{(1,2)} = \Delta n_i \quad (2.34)$$

Cette quantité sera égale à +1 si une particule est ajoutée, 0 si une particule est déplacée et égale à -1 si une particule est éliminée. On peut également donner les expressions de la variation de l'énergie nucléaire qui est simplement régie par :

$$\Delta E_n^{(1,2)} = -\epsilon \Delta n_i \sum_{\langle k \rangle_i} n_k \quad (2.35)$$

où la somme sur  $k$  porte sur les sites proches voisins du site  $i$ , ainsi que celle de l'énergie Coulombienne :

$$\begin{aligned} \Delta E_C^{(1,2)} &= E_C^{(2)} - E_C^{(1)} \\ &= \frac{\kappa}{2} \left[ n_i^{(2)} \left( \sum_{j \neq i}^N n_j C_{ij} + n_i^{(2)} C_{ii} \right) - n_i^{(1)} \left( \sum_{j \neq i}^N n_j C_{ij} + n_i^{(1)} C_{ii} \right) \right] \\ &= \frac{\kappa}{2} \Delta n_i \left( \sum_{j \neq i}^N n_j C_{ij} + C_{ii} \right) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Pour chaque couple de température  $(\beta_n, \beta_C)$  donné, le réseau est initialisé de manière aléatoire, et l'algorithme de Metropolis est ensuite itéré un très grand nombre de fois afin de thermaliser le système. Cette condition de thermalisation est observée lorsque l'on atteint la convergence de la valeur moyenne de toutes les observables, tel que l'énergie d'interaction nucléaire et Coulombienne. Une fois les premiers tirages préliminaires effectués, on peut commencer à comptabiliser l'ensemble des événements. Néanmoins une très forte corrélation existe entre les événements (1) et (2) car ils ne diffèrent que par l'occupation d'un site, et ceci peut biaiser de manière significative l'ensemble des tirages. Pour éliminer ces corrélations spurieuses, seul un événement parmi  $m$  acceptés par l'algorithme Metropolis est utilisé pour le calcul des observables. Afin d'estimer le nombre d'itérations  $m$  nécessaire, entre deux événements non corrélés, il est nécessaire de calculer la fonction d'autocorrelation [24] définie par :

$$f(m) = \sum_{(n)}^N \frac{\left( E_{\text{Total}}^{(n)} - \langle E_{\text{Total}} \rangle \right) \left( E_{\text{Total}}^{(n+m)} - \langle E_{\text{Total}} \rangle \right)}{N} \quad (2.37)$$

où  $m$  est le nombre d'itérations séparant deux événements et  $\langle E_{\text{Total}} \rangle$  la valeur moyenne de l'énergie totale. La fonction de corrélation doit être négligeable en l'absence de corrélations. Afin de valider notre modèle, le test de thermalisation et le test de décorrélation devront être effectués, à chaque fois que nous changerons la taille du réseau ou la température du système. Pour donner des ordres de grandeur, lorsque l'on effectue des calculs avec un réseau de volume  $V = 10^3$ , et pour des températures supérieures ou égales à 2MeV, la thermalisation requiert environ 500000 itérations, et 5000 tirages sont nécessaires pour considérer que deux événements sont indépendants.

## 2.3 Propriétés thermodynamiques de la matière d'étoile dans le modèle Ising-Star.

### 2.3.1 Diagramme des phases pour une matière neutre et une matière d'étoile chargée.

La thermodynamique du modèle d'Ising correspondant à la matière d'étoile neutre en charge est très bien connue. Le but de ce travail est d'étudier l'influence de l'interaction Coulombienne sur cette thermodynamique. La première étude que nous pouvons mener, est d'accéder au diagramme des phases [39, 40] aussi bien pour une matière d'étoile neutre en charge que pour une matière d'étoile chargée. Ce dernier est accessible dans l'espace  $(\beta_n, \beta_C)$  en regardant la distribution du nombre de particules dans l'ensemble multi-grand-canonique avec le potentiel chimique  $\mu = \mu_C$ . Le calcul consiste à extraire cette fonction de distribution à l'aide de l'algorithme de Metropolis en faisant varier  $\beta_n$  pour différents  $\beta_C$  fixés. Commençons par le cas le plus simple, c'est à dire par le système neutre en charge où  $\beta_C = 0$ . Il s'agit du cas Ising bien connu dans la littérature, dont le diagramme des phases est représenté sur la figure (2.3) en ligne tiretée. Cette dernière n'est rien d'autre que le maximum de la fonction de distribution de particules, et qui correspond à la valeur la plus probable de la densité pour la contrainte fixée à la limite thermodynamique [41]. Pour les basses températures, c'est à dire pour un grand  $\beta_n$ , le système est caractérisé par la coexistence de deux phases, représentées par deux pics de même amplitude dans la distribution des événements. L'un représentant la phase gaz pour les basses densités, et l'autre la phase liquide pour les plus hautes densités. Cette coexistence de type liquide-gaz se termine par un point critique du second ordre (fig(2.3) point 2). Nous confirmerons par la suite les propriétés de criticité de ce point transition à l'aide d'une étude de finite size scaling. Au delà de ce point de transition, nous avons une phase fluide donnée par un unique pic, où l'on ne distingue plus le liquide et le gaz. On peut rééditer le même calcul pour la matière d'étoile chargée en augmentant progressivement la valeur de  $\beta_C$ . On constate que la phénoménologie est similaire lorsque l'on compare notre système chargé au système neutre. Néanmoins on remarque que le point de transition (fig(2.3) point 4) croît lorsque l'on augmente  $\beta_C$  et il nous est impossible pour l'instant de déterminer si il s'agit d'un point critique ou non. Cette augmentation du point de transition avec  $\beta_C$  est un résultat opposé à celui qui a été obtenu pour de nombreux systèmes frustrés par interaction Coulombienne [25, 26, 27, 28, 29]. L'un des exemples est celui du modèle d'Ising frustré utilisé pour les noyaux atomiques, où la zone de coexistence a tendance à être réduite [24].

Toutefois dans aucun des systèmes étudiés la charge des particules est écranté par un fond homogène de signe opposé, comme il est le cas dans la matière d'étoile. Un calcul de



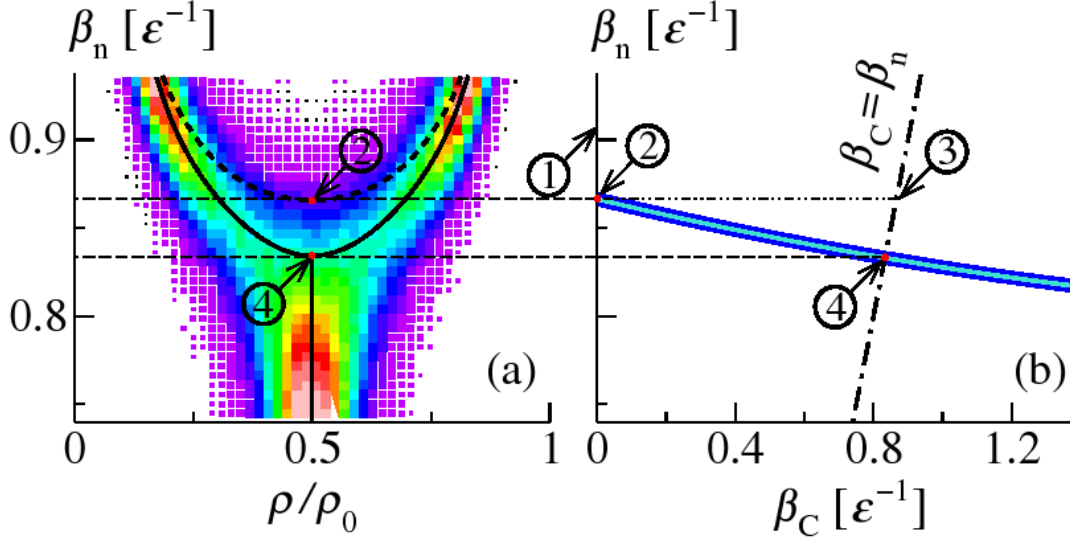


FIG. 2.3 – Calcul Metropolis pour un réseau de volume  $V = 10^3$ . Les lignes donnent les maxima de la distribution du nombre de particules pour chaque température  $\beta_n$ . (a) La ligne tiretée représente la diagramme des phases pour le modèle d'Ising usuelle ( $\beta_C = 0$ ). La ligne continue représente le système chargé, avec  $\beta_C = 0.83\epsilon$  qui correspond à une fraction protonique typique  $x = 1/3$ . Les points (2) et (4) représentent respectivement les températures limite pour  $\beta_C = 0$  et  $\beta_C = \beta_n$ . (b) Diagramme des phases dans l'ensemble multicanonique où l'inverse de la température limite  $\beta_n$  est en une fonction de  $\beta_C$ . Les points (1) et (3) sont utilisés dans la figure (fig(2.4))

RMF à température nulle [14] pour la matière d'étoile suggère au contraire que la zone de coexistence s'élargit si l'on tient compte des effets de la frustration Coulombienne. Nos calculs sont en accord qualitatif avec ce résultat, dans le sens où l'on prédit une persistance de cet effet à température finie. Regardons maintenant l'influence de la frustration Coulombienne sur la criticité de notre système.

### 2.3.2 Étude de la criticité de la matière d'étoile.

#### Étude dans le plan $(E_n, E_c)$ .

Nous allons voir que regarder l'ensemble des événements dans le plan  $(E_n, E_c)$  [39] va nous permettre de comprendre pourquoi la température de transition augmente lorsque l'on tient compte de la frustration Coulombienne, et que l'on peut également obtenir une première indication du fait que le point limite n'est pas un point critique. Considérons dans un premier temps le système neutre, où l'observable  $E_C$  ne représente pas une énergie Coulombienne physique, mais elle mesure la compacité du système. Cette dernière n'entre pas en compte dans la fonction de partition puisque l'on a considéré  $\beta_C = 0$  et les partitions clustérisées avec une haute contribution de l'observable  $E_C$  pourront être explorées. En partant d'un système sous critique (point 1) où l'on distingue les deux phases pures, vers un système critique (fig(2.4) point 2), on peut remarquer que l'on explore une très large collection d'événements dans le plan  $(E_n, E_c)$ . Si l'on passe maintenant du système neutre à la température de transition vers le système chargé (fig(2.4) point 3) qui est exactement

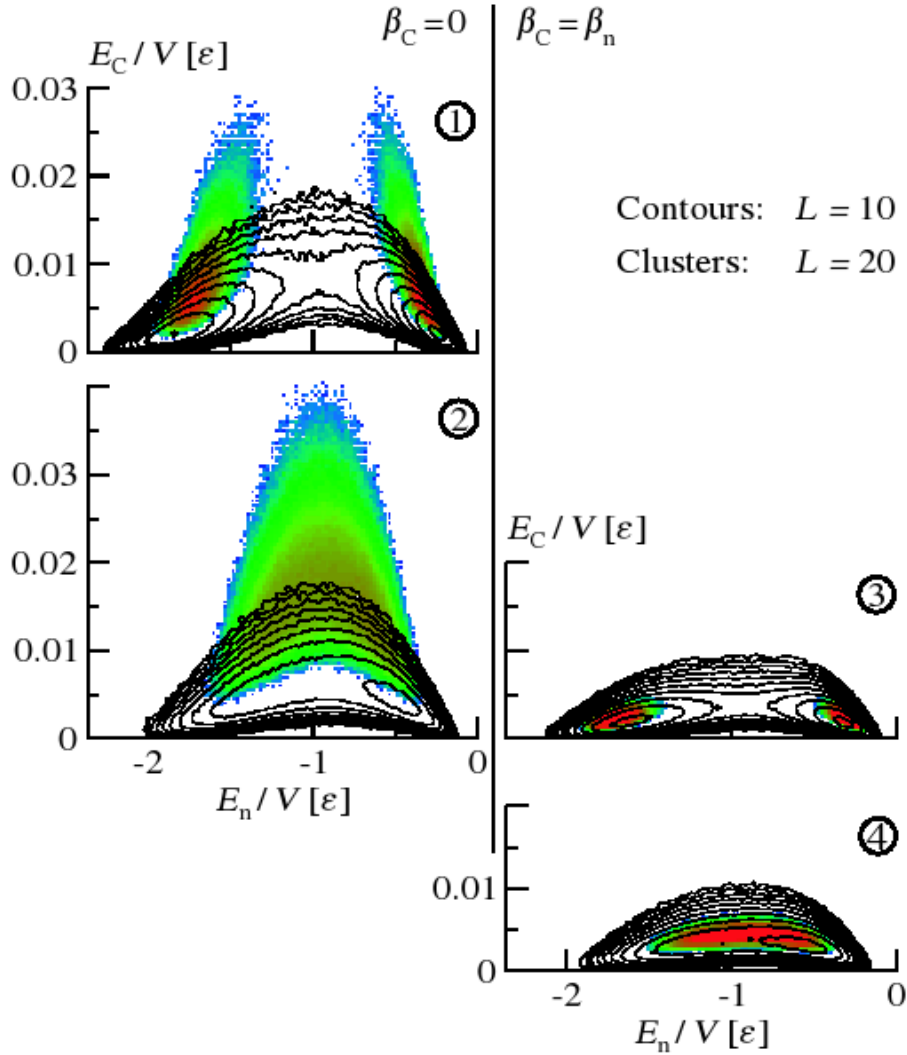


FIG. 2.4 – Distribution de probabilité dans le plan  $(E_n, E_c)$  où les quatre points correspondent à ceux localisés dans la figure (2.3). Les calculs réalisés pour des réseaux de volume  $V = 10^3$  et  $V = 20^3$  sont respectivement représentés par les points et les traits continus. Les points (1) et (3) représentent la distribution bimodale en dessous du point de transition. Les points (2) et (4) représentent la phase mixte à la température limite, où l'on observe l'existence d'un phénomène critique au point (2) et son absence au point (4).

à la même température tout en imposant  $\beta_C = \beta_n$ , on retrouve les deux phases pures, où l'énergie Coulombienne tend à être minimale tandis que pour les densités proches de  $\rho/\rho_0 = 0.5$  elle est plus élevée. La charge des nucléons est exactement compensée par celle des électrons si la distribution des nucléons est homogène, c'est à dire dans les phases pures. De telles phases sont donc favorisées si  $\beta_C \neq 0$ . Le retardement du point de transition (point 4) est entièrement dû à l'écrantage des électrons. Cet effet est observé car nous avons imposé un fond d'électrons uniforme, c'est à dire que nous avons considéré une polarisation négligeable des électrons par les nucléons. A l'aide de ce diagramme on peut également distinguer la suppression de criticité pour le système chargé. Commençons d'abord par relier la fonction de corrélation  $\sigma$  à la densité d'énergie Coulombienne. A la limite continue

nous pouvons écrire :

$$\left\langle \frac{E_C}{V} \right\rangle \propto \frac{\kappa}{2V} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma(|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \propto 2\pi\kappa \int_0^{\infty} \sigma(r) r dr \quad (2.38)$$

avec

$$\begin{aligned} \sigma(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) &= \langle \delta n_i \delta n_j \rangle \\ &= \langle n_i n_j \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle \end{aligned} \quad (2.39)$$

et l'on prendra pour notation dans la suite de l'exposé  $\sigma(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \sigma_{i,j}$ . Au voisinage d'un point critique,  $\sigma(r)$  admet la forme analytique suivante :

$$\sigma(r) \propto \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{D-2+\eta}} \quad (2.40)$$

où  $\xi$  est la longueur de corrélation,  $D$  la dimension de l'espace et  $\eta$  un exposant critique égale à 0.0375 pour le modèle d'Ising. Les phénomènes critiques étant caractérisés par une divergence des longueurs de corrélations, la fonction de corrélation tendra vers une constante et par conséquent, la densité d'énergie Coulombienne divergera elle aussi à son tour. Ceci est parfaitement possible pour  $\beta_C = 0$ , car l'énergie Coulombienne  $E_C$  ne rentre pas dans le poids statistique. Étant donné que la divergence des longueurs de corrélation va être limitée par la taille finie du réseau, il est nécessaire d'effectuer ce test pour différentes tailles afin d'en apprécier les effets. Si l'on revient au cas du système neutre en charge, la divergence de la densité d'énergie Coulombienne est confirmée lorsque l'on augmente la taille du réseau, et nous sommes donc bien en présence d'un phénomène critique. Par contre si l'on considère le système chargé au point de transition, la densité d'énergie Coulombienne converge vers une constante à la limite thermodynamique. Cela donne une première indication de la suppression de la criticité du point de transition lorsque l'on tient compte de la frustration Coulombienne. Notre modèle semble donc ne pas appartenir à la classe d'universalité d'Ising. Pour appuyer notre argumentation nous allons maintenant réaliser des calculs de finite size scaling [37, 38, 39, 40] afin de confirmer ce résultat.

### Finite size scaling.

Nous avons déjà remarqué qu'une véritable divergence de la longueur de corrélation ne peut pas être atteinte avec la réalisation numérique de notre modèle. En effet, bien que la méthode des répliques permet d'intégrer exactement l'interaction Coulombienne en éliminant tout effets de bord, la longueur de corrélation reste limitée par la dimension linéaire finie du réseau. Dans cette condition, l'étude de la criticité passe nécessairement par une étude des lois d'échelle avec des technique connues dans la littérature sous le nom de "finite size scaling". Nous allons montrer que le modèle Ising-Star comporte une suppression des lois d'échelle qui caractérisent tout point critique. Une des première lois d'échelle [37, 38] qui peut être utilisée, est celle reliant la convergence de la température critique à la taille du réseau :

$$|T_C(L) - T_C| \propto L^{-1/\nu} \quad (2.41)$$

où  $\nu$  est un exposant critique qui peut être également relié à la longueur de corrélation par :

$$\xi(t) \propto t^{-\nu} \quad (2.42)$$

avec  $t = T/T_C - 1$ . Si l'on considère le système neutre, on retrouve la bonne valeur pour cet exposant critique (fig(2.5) point a) :  $\nu = 0.66$ . Il en est de même pour la température limite qui converge vers la valeur finie  $T_C = 1.128\epsilon$  lorsque l'on augmente la taille du réseau. Revenons maintenant au cas de la matière chargée (fig(2.5) point b), où la température limite  $T_{\text{lim}} = 1.201\epsilon$  est atteinte quelle que soit la taille du réseau. Cela nous indique donc que l'exposant  $\nu$  tend à être large. Nos résultats numériques sont compatible avec  $\nu = \infty$ , ce qui implique que la longueur de corrélation est finie au point de transition.

On peut également définir un ensemble de lois d'échelles pour la susceptibilité magnétique [37, 38]  $\chi = \sum_{i,j} \sigma_{i,j}/T$  avec :

$$L^{-\gamma/\nu} \chi \propto (L^{1/\nu} |t|)^{-\gamma} \text{ si } \xi \ll L, T \geq T_{\text{lim}}(L) \quad (2.43)$$

où  $\beta$  et  $\gamma$  sont deux autres exposants critiques. Cette loi tend vers une constante indépendante de la taille du réseau et de la température lorsque pour le point critique on atteint la limite  $\xi \approx L$ . Pour les températures inférieures à la température limite, la susceptibilité présente un saut entre les basses densités  $\langle n \rangle_G$  et les hautes densités  $\langle n \rangle_L$  où le paramètre d'ordre  $\Delta\rho = \langle n \rangle_L - \langle n \rangle_G$  varie avec une loi d'échelle comme :

$$\Delta\rho \propto |t|^\beta \quad (2.44)$$

avec laquelle on obtient une loi d'échelle du premier ordre pour la susceptibilité donnée par :

$$\chi \propto t^{2\beta} L^d \quad (2.45)$$

où le paramètre  $d$  définit une loi dite d'"hyperscaling" entre les exposants  $\nu$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  selon :

$$d = \frac{\gamma + 2\beta}{\nu} \quad (2.46)$$

On peut finalement condenser l'ensemble des lois d'échelles pour la susceptibilité avec :

$$L^{-\gamma/\nu} \chi \propto \begin{cases} (L^{1/\nu} |t|)^{-\gamma} & \text{si } \xi \ll L, T \geq T_{\text{lim}}(L) \\ (L^{1/\nu} |t|)^{2\beta} & \text{si } \xi \ll L, T < T_{\text{lim}}(L) \\ \text{Constante} & \text{si } \xi \approx L \end{cases} \quad (2.47)$$

En utilisant l'ensemble de ces lois d'échelles pour le système neutre, on retrouve les exposants critiques de la classe d'universalité d'Ising (fig(2.5) partie (c)) c'est à dire  $\beta$  pour  $T < T_{\text{lim}}(L)$  et  $\gamma$  pour  $T \geq T_{\text{lim}}(L)$ , avec l'exposant critique  $\nu$  fixé qui a été déterminé auparavant avec la loi d'échelle sur la température limite (fig(2.5) partie (a)). L'ensemble de la méthode est consistant. Nous confirmons également la relation d'hyperscaling  $\gamma = 3\nu - 2\beta$ , ainsi que la convergence des lois d'échelle à la température limite vers une unique constante indépendante de la taille du réseau. Si l'on revient maintenant au cas du système chargé, on a trouvé précédemment que  $\nu \rightarrow \infty$  (fig(2.5) partie (b)), ce qui implique que  $\gamma/\nu \rightarrow 0$ , et l'on remarque que seuls les points avec une température très grande devant la température limite convergent vers une seule et unique droite (fig(2.5) partie (d)). Pour les températures inférieures à la température limite on a une dispersion des droites dépendante de la taille des réseaux. Il en est de même à la température limite où les lois d'échelle convergent vers une constante dépendante de la taille du réseau.

Ces résultats démontrent clairement que la frustration Coulombienne supprime la criticité à la température limite. Le modèle Ising-Star ne peut être répertorié dans la classe d'universalité d'Ising et cela confirme l'ensemble de nos résultats établis dans le plan  $(E_n, E_C)$ .

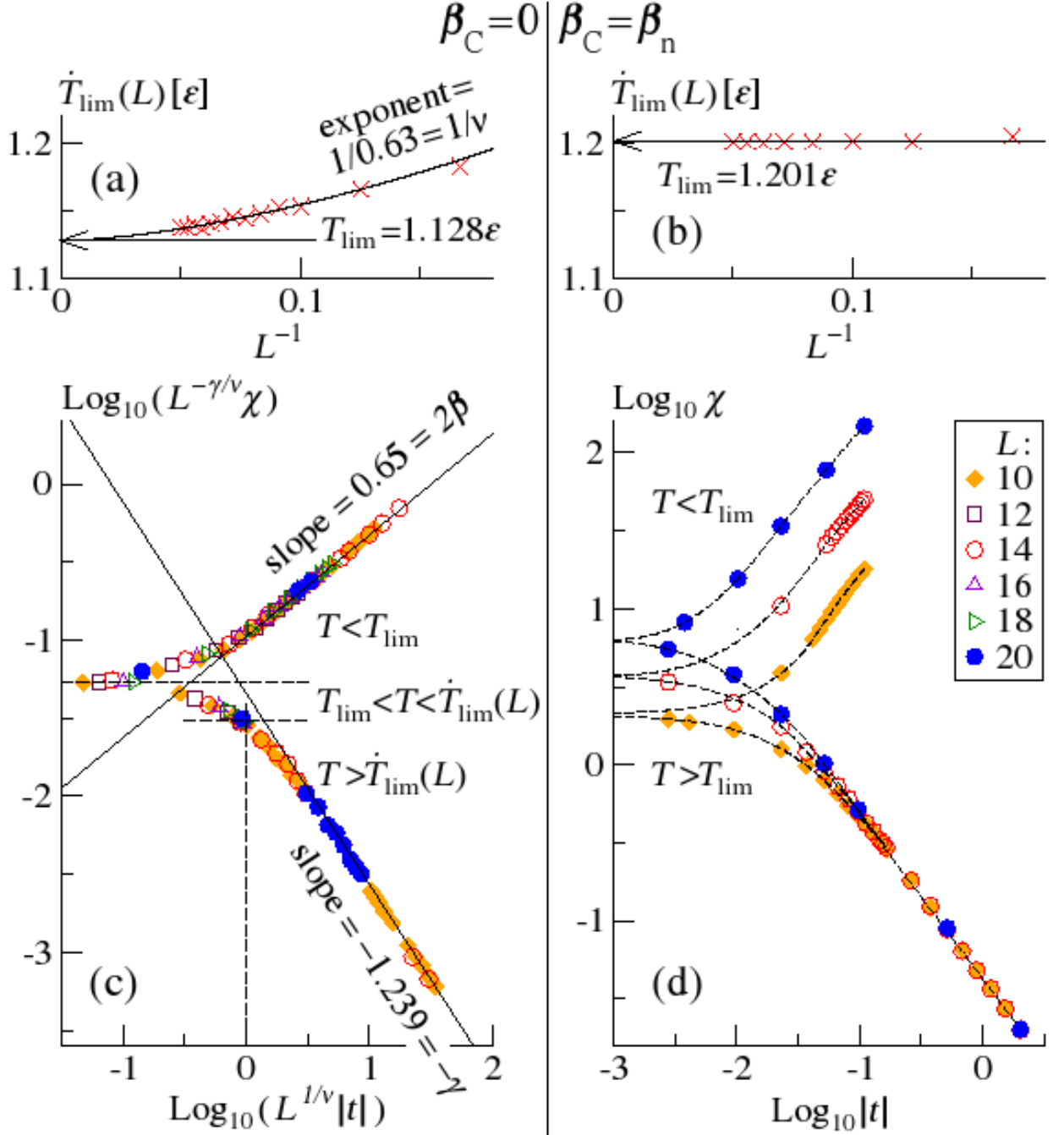


FIG. 2.5 – Ensemble des calculs de Finite Size Scaling pour le système neutre (partie de gauche) et pour un système chargé (partie de droite). Les parties (a) et (b) représentent l'évolution de la température limite en fonction de la taille du réseau, avec une extrapolation vers la limite thermodynamique. Les parties (c) et (d) correspondent à l'étude des lois d'échelle sur la susceptibilité. On remarque une très bonne consistance pour  $\beta_C = 0$  et une nette violation lorsque  $\beta_C = \beta_n$ .

## 2.4 Conclusions et perspectives concernant le modèle Ising-Star.

Dans le cadre de notre modèle Ising-Star, nous avons démontré que la frustration Coulombienne a tendance à élargir la zone de coexistence liquide-gaz avec une augmentation de la température limite pour le point de transition. Ce résultat est en opposition au cas des systèmes finis tels les noyaux atomiques, ce qui est entièrement dû à l'écrantage des électrons. Nous avons également démontré à l'aide d'une étude dans le plan  $(E_n, E_C)$ , ainsi qu'avec des calculs de "finite size scaling" que la criticité du point limite était supprimée, et que le modèle Ising-Star n'appartient à aucune classe d'universalité car il n'admet pas de point critique. La suppression de la criticité implique que l'opacité de la matière d'étoile aux neutrinos est finie, et elle ne peut pas induire un piégeage complet de ces derniers dans l'écorce des proto-étoiles à neutrons [9]. Il est également possible que la frustration Coulombienne induise d'autres points de transitions à plus basse température et que l'on retrouve les phases "pastas". Nous n'avons malheureusement pas étudié l'existence de ces phases à plus basse température, car les temps de thermalisation pour des températures inférieures à quelques MeV croissent de manières assez significatives. Il serait envisageable de regarder cette partie du diagramme des phases en utilisant une méthode de "parallel tempering" [42, 43] afin d'accélérer la thermalisation pour les basses températures. Cette méthode consiste à faire des calculs de type Métropolis en effectuant des échanges de configurations entre système à différentes températures. Une des autres perspectives intéressantes serait de tenir compte des effets liés à l'isospin sur le déplacement du point de transition.

Il faut noter que l'ensemble des résultats obtenus avec le modèle Ising-Star est entièrement générique, et ces résultats devraient continuer à être qualitativement valides pour un Hamiltonien réaliste. Du point de vue quantitatif, seulement un modèle qui utiliserait des interactions effectives optimisées sur la matière nucléaire et inclurait la nature fermionique des nucléons, nous pourrions véritablement estimer de manière fiable l'augmentation de la température limite, et la position des lignes de transitions de phase. Nous allons maintenant essayer de confirmer le résultat Ising Star à l'aide du groupe de renormalisation. Nous essayerons par ce biais de comprendre pourquoi et dans quelles conditions on peut avoir une suppression des phénomènes critiques lorsque l'on combine des interactions à courte et longue portée.



## Chapitre 3

# Utilisation de la méthode du groupe de renormalisation pour étudier la criticité d'un système de spins interagissant à l'aide d'une interaction de portée infinie.

### 3.1 Introduction.

Dans le chapitre précédent, nous avons donné plusieurs arguments pour montrer que la température limite de la transition de phase du modèle Ising-star ne correspond pas à un point critique. Les mêmes conclusions sont obtenues dans la référence [33, 34] pour un modèle similaire, où les auteurs montrent que le point limite correspond à une transition du premier ordre. Ce résultat implique en particulier que la longueur de corrélation est finie, pour toute valeur de température de la matière d'étoile, et par conséquent le phénomène d'interaction cohérente entre les neutrinos. La matière ne peut pas avoir une grande influence sur l'opacité des neutrinos tout au moins en ce qui concerne les collisions élastiques [7, 8, 9, 10]. Il s'agit d'un résultat important, et il est essentiel de s'assurer qu'il ne dépend pas du modèle utilisé pour modéliser la matière d'étoile. En particulier dans notre analyse Ising-star, l'hypothèse clé nécessaire à l'obtention de ce résultat était l'absence de polarisation du gaz d'électrons, que nous avons modélisé comme un fond homogène. Une polarisation du gaz d'électrons agirait comme un écrantage partiel de l'interaction Coulombienne entre protons, ce qui peut être équivalent à un changement de la portée effective de l'interaction Coulombienne. Il serait donc très intéressant de disposer d'un outil théorique permettant d'étudier l'existence de point critique, en fonction de la présence de forces frustrantes de différente portée. L'objectif de ce chapitre, malheureusement pas entièrement achevé par manque de temps, est de fournir un tel outil à l'aide de la méthode du groupe de renormalisation appliquée à un système de spins en interaction.

Si l'on part initialement d'un système de spins interagissant uniquement avec leurs proches voisins, à la température critique  $T_C$ , le système présente des propriétés remarquables, dont l'une des principales est la divergence des longueurs de corrélation, si bien qu'un spin donné ressentira l'influence de tous les spins du réseau. Cette divergence des longueurs de corrélation se traduit également par une propriété d'invariance d'échelle du



système, c'est à dire que si l'on effectue progressivement des photographies successives, et ceci à des résolutions différentes, le système conservera les mêmes caractéristiques. Pour une telle situation la technique du groupe de renormalisation consiste à réduire le nombre de spins en interaction en effectuant progressivement des transformations d'échelle successives sur le système initial. On part donc d'une échelle donnée, à partir de laquelle on va former des super-blocs de spins, tout en déterminant les nouvelles constantes de couplage de la nouvelle échelle à partir de celles de l'ancienne échelle. Ceci va constituer une TGR (Transformation du Groupe de Renormalisation), technique qui a été fortement utilisée au cours des années 70, pour le cas des systèmes de spins en interaction à courte portée [44, 37, 45, 46, 47, 48, 49, 50]. A la température critique  $T_C$ , la TGR va se traduire mathématiquement par l'existence d'un point fixe instable : il existe une échelle donnée à partir de laquelle les constantes de couplage ne sont plus modifiées par une application successive de la TGR. Le but de ce chapitre sera de proposer dans un premier temps, une TGR plus générale qui s'applique aux systèmes de spins en interaction à longue portée, et que nous appellerons TGGR (Transformation Générale du Groupe de Renormalisation). L'idée sera ensuite de l'appliquer au cas pratique du modèle Ising Star [39, 40]. Etant donné que ce dernier n'admet pas de point critique, nous devons confirmer que ce celui-ci ne vérifie pas l'équation du point fixe sous une TGGR. Nous terminerons ce chapitre en évoquant des futures perspectives pouvant être appliquées à d'autres modèles plus généraux, afin d'étudier la possible influence d'une polarisation du gaz d'électrons sur la thermodynamique des étoiles à neutrons.

### 3.2 Transformation générale du groupe de renormalisation (TGGR).

Au cours de cette sous-partie nous allons présenter le formalisme de base de la TGGR. Considérons un système de spins en interaction, où la topologie, et la dimension du réseau peuvent être quelconque. Le pas du réseau est égale à "L", et le Hamiltonien du système est donné par :

$$H = - \sum_{\alpha, \beta} J_{\alpha, \beta} \left( \left| \vec{\alpha} - \vec{\beta} \right| \right) S_{\alpha} S_{\beta} \quad (3.1)$$

où la somme court sur les sites du réseau, et nous avons fait l'hypothèse que l'interaction ne dépend que de la distance relative entre deux sites. La forme de l'interaction  $J_{\alpha, \beta}$  peut être quelconque, et l'on peut aussi bien mélanger des interactions de portée finie, que des interaction de portée infinie. On peut aussi mélanger des interactions ferromagnétiques et anti-ferromagnétiques, ou ne considérer qu'une seule des deux. Nous prendrons pour notation dans la suite de l'exposé que :

$$C_{\alpha, \beta} = \beta J_{\alpha, \beta} \quad (3.2)$$

où  $\beta$  est l'inverse de la température. L'idée du groupe de renormalisation est de former des blocs de spins  $\alpha'$ , qui traduisent le changement d'échelle d'un facteur "L" où :

$$S'_{\alpha'} = R[S_{\alpha}] \quad (3.3)$$

et la valeur  $S'_{\alpha'}$  du super-bloc est donnée par une règle qui est différente selon la dimension du spin  $S_{\alpha}$  :

$$S'_{\alpha'} = \max(f_{\alpha'}(S)) \quad (3.4)$$

avec

$$f_{\alpha'}(S) = \sum_{\alpha \in \alpha'} \delta(S_{\alpha} - S) \quad (3.5)$$

On peut remarquer que pour le cas particulier où chacun des spins du réseau est égal à  $S_{\alpha} = \pm 1$ , alors la valeur du spin  $S'_{\alpha'}$  du super-bloc sera égal au signe de la somme des spins originels appartenant au super-bloc  $\alpha'$ , et les relations (3.4) et (3.5) se réécrivent sous la forme suivante :

$$S'_{\alpha'} = \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha} \right) \quad (3.6)$$

Pour que la définition du super-bloc de spin (3.4) donne bien une valeur de spin, on réalisera des super-blocs uniquement à partir d'un nombre impair de spins, et ceci pour les  $N_{\text{conf}}$  configurations possibles des spins initiaux :

$$N_{\text{conf}} = N_{\text{spin}}^{L^D} \quad (3.7)$$

où "D" est la dimension du réseau,  $N_{\text{sites}}$  est le nombre de spins regroupés pour former un super-bloc :

$$N_{\text{sites}} = L^D \quad (3.8)$$

$N_{\text{spins}}$  est le nombre de valeurs possibles du degré de liberté, qui est égal à 2 pour le cas particulié d'un spin  $\frac{1}{2}$  qui nous intéresse. L'expression du couplage renormalisé sera définie à partir des anciennes constantes de couplages de l'ancienne échelle par une transformation d'échelle qui peut s'écrire :

$$C'_{\alpha', \beta'} = R[C_{\alpha, \beta}] \quad (3.9)$$

L'enjeu essentiel de la procédure de renormalisation est de trouver les expressions de ces nouvelles constantes de couplage à la nouvelle échelle. La condition à respecter pour que la transformation de renormalisation représente bien une différente échelle, et non une perturbation du système physique, est que les caractéristiques thermodynamiques soient invariantes par changement d'échelle. Ceci est vérifié si le logarithme de la fonction de partition  $Z$  n'est pas affecté, et ceci à une constante près, par la TGGR, c'est à dire si :

$$Z = \sum_{[S]} e^{-\beta H[S]} \propto \sum_{[S']} e^{-\beta' H'[S']} \quad (3.10)$$

où

$$\sum_{[S]} = \prod_{\alpha} \sum_{S_{\alpha}}^{N_{\text{spins}}} \quad (3.11)$$

Si l'on considère un bloc particulier  $S'_{\alpha'}$ , sa valeur est entièrement déterminée par la valeur des spins qui le constituent, mais l'inverse n'est pas vrai car pour une même valeur du bloc, ils existent plusieurs configurations possibles des spins à l'échelle inférieure. Il en sera de même pour l'expression des constantes de couplage, sauf pour le cas particulier des points fixes que nous expliquerons par la suite. Ce qui explique pourquoi le groupe

de renormalisation n'est pas un vrai groupe, mais un semi-groupe : on ne peut effectuer les transformation d'échelle que dans un sens donné, c'est à dire des petites échelles vers les plus grandes. Si nous fixons notre attention sur un super-bloc quelconque  $\alpha'$ , on peut définir la relation suivante :

$$\sum_{S'_{\alpha'}}^{N_{\text{spins}}} \delta \left( S'_{\alpha'} - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha} \right) \right) = 1 \quad (3.12)$$

et qui peut encore s'écrire

$$\prod_{\alpha'} \sum_{S'_{\alpha'}}^{N_{\text{spins}}} \delta \left( S'_{\alpha'} - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha} \right) \right) = 1 \quad (3.13)$$

ou aussi

$$\sum_{[S']} \delta \left( S'_{\alpha'} - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha} \right) \right) = 1 \quad (3.14)$$

On peut decomposer le Hamiltonien total à l'ancienne échelle, par une somme de deux Hamiltoniens tel que :

$$H[S] = H_0[S] + H_1[S] \quad (3.15)$$

où  $H_0$  est la somme des interactions entre spins appartenant à un même bloc  $\alpha'$ , et  $H_1$  est le Hamiltonien qui tient compte des interactions entre super-blocs de spins de la nouvelle échelle. La fonction de partition associée à  $H_0$  peut être factorisée sur les super-blocs. En effet les super-blocs sont indépendants entre eux en ce qui concerne  $H_0$  :

$$H_0[S] = \sum_{\alpha'} h_0^{\alpha'} \quad (3.16)$$

où l'opérateur  $h_0^{\alpha'} = - \sum_{\alpha, \beta \in \alpha'} J_{\alpha, \beta} S_{\alpha} S_{\beta}$  n'inclue que les interactions à l'intérieur du super bloc  $\alpha'$ , ce qui implique que :

$$\begin{aligned} Z_0 &= \sum_{[S]} \exp(-\beta H_0[S]) \\ &= \prod_{\alpha'} z_0^{\alpha'} \\ &= (z_0^{\alpha'})^{N/L^D} \end{aligned} \quad (3.17)$$

où  $N$  est le nombre de spin initial, et la fonction de partition du super-bloc  $\alpha'$  est donnée par :

$$z_0^{\alpha'} = \sum_{[S]'} \exp(-\beta h_0^{\alpha'}) \quad (3.18)$$

où la somme  $\sum_{[S]'} = \prod_{\alpha \in \alpha'} \sum_{S_{\alpha}}^{N_{\text{spins}}}$  est restreinte au super-bloc  $\alpha'$ , c'est à dire celle correspondant à une somme sur les  $N_{\text{conf}}$  configurations. Étant donné qu'ils n'existent que

### 3.2. TRANSFORMATION GÉNÉRALE DU GROUPE DE RENORMALISATION. 35

$N_{\text{spins}}$  valeurs possibles pour chaque spin  $S_\alpha$  à toutes les échelles de renormalisation, on peut mettre en évidence dans la fonction de partition  $Z_0$ , la somme sur toutes les partitions correspondantes à chaque valeur du spin. En effet nous pouvons écrire :

$$z_0^{\alpha'} = \sum_{S'}^{N_{\text{spins}}} z_0^{\alpha'}(S') \quad (3.19)$$

avec

$$z_0^{\alpha'}(S') = \sum_{[S]'} \delta \left( S' - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_\alpha \right) \right) \exp \left( -\beta h_0^{\alpha'} \right) \quad (3.20)$$

et on peut aussi définir pour le système total :

$$\begin{aligned} Z_0(S') &= \prod_{\alpha'} z_0^{\alpha'}(S') \\ &= (z_0^{\alpha'}(S'))^{N/L^D} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Nous pouvons remarquer que dans le cas général, la relation entre  $Z_0$  et  $Z_0(S')$  est non-triviale où :

$$\begin{aligned} Z_0 &= \prod_{\alpha'} z_0^{\alpha'} \\ &= \prod_{\alpha'} \sum_{S'}^{N_{\text{spins}}} z_0^{\alpha'}(S') \\ &\neq \sum_{S'}^{N_{\text{spins}}} Z_0(S') \end{aligned} \quad (3.22)$$

Toutefois dans le cas particulier d'une invariance du Hamiltonien  $h_0^{\alpha'}$  par rapport à la direction de l'aimantation du super-bloc, comme notamment dans le cas du modèle d'Ising standard en l'absence de champ magnétique, et aussi dans le cas du modèle Ising-star, alors  $Z_0(S') = Z_0(-S')$  et la quantité  $Z_0(S')$  est effectivement une mesure de la fonction de partition de  $H_0$  par :

$$Z_0 = (N_{\text{spins}})^{N/L^D} Z_0(S') \quad (3.23)$$

L'expression (3.21) de  $Z_0(S')$  ne comporte qu'une somme sur les interactions entre les spins qui constituent un super bloc  $\alpha'$ , et cela peut être calculé en pratique de manière analytique. Nous pouvons maintenant déterminer l'équation qui nous donne l'expression du Hamiltonien renormalisé. En partant des équations (3.14), (3.15), et (3.21) on peut écrire l'expression suivante :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{[S]} e^{-\beta H[S]} \\ &= \sum_{[S]} \sum_{[S']} \delta \left( S'_\alpha - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_\alpha \right) \right) e^{-\beta H_0[S]} e^{-\beta H_1[S]} \\ &= \sum_{[S']} \frac{\sum_{[S]} \delta \left( S'_\alpha - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_\alpha \right) \right) e^{-\beta H_0[S]} e^{-\beta H_1[S]}}{\sum_{[S]} \delta \left( S'_\alpha - \text{signe} \left( \sum_{\alpha \in \alpha'} S_\alpha \right) \right) e^{-\beta H_0[S]}} Z_0(S') \\ &= \sum_{[S']} \langle e^{-\beta H_1[S]} \rangle_0 Z_0(S') \end{aligned} \quad (3.24)$$

et par identification on en déduit la relation formelle qui lie le nouvel Hamiltonien  $H'[S']$  à celui de l'ancienne échelle :

$$e^{-H'[S']} = \langle e^{-H_I[S]} \rangle_0 Z_0(S') \quad (3.25)$$

Cette expression ne peut être évaluée exactement. Une solution consiste à développer cette expression en cumulants ([37, 46, 47, 48, 49, 50]), et restreindre le développement aux premiers ordres. Au premier ordre, remplace simplement la moyenne de l'exponentielle, par l'exponentielle de la moyenne :

$$\begin{aligned} \ln \langle e^{-H_I[S]} \rangle_0 &= -\langle H_I[S] \rangle_0 + \frac{1}{2} (\langle H_I[S]^2 \rangle_0 - \langle H_I[S] \rangle_0^2) - \frac{1}{6} (\dots) \\ &\simeq -\langle H_I[S] \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Pour les TGR appliquées au modèle d'Ising, de nombreuses études ont été réalisées à des ordres supérieurs dans le but d'obtenir une meilleure estimation de la température critique [46, 47, 48, 49, 50]. On peut mentionner que le fait d'augmenter l'ordre du développement a pour conséquence de générer des couplages à plus longue portée. La puissance des ordinateurs actuels permet d'obtenir des estimations de la température critique bien plus précise par méthode Montecarlo [38], et le développement en cumulants d'ordre supérieur n'a plus le même intérêt que dans les années 70. Nous nous intéressons à la TGR afin d'obtenir des informations qualitatives (présence ou non de criticité) sur les systèmes présentant des interactions à longue portée. Le développement au premier ordre est à ce but suffisant et avec notre approximation, nous pouvons maintenant déterminer les constantes de couplages à la nouvelle échelle. En effet l'équation (3.10) implique :

$$\beta' H'[S'] = \beta \langle H_I[S] \rangle_0 \quad (3.27)$$

et en considérant la définition de  $H_I$ , nous avons aussi :

$$C'_{\alpha',\beta'} S'_{\alpha'} S'_{\beta'} = \sum_{\alpha \in \alpha', \beta \in \beta'} C_{\alpha,\beta} \langle S_{\alpha} S_{\beta} \rangle_0 \quad (3.28)$$

où la somme  $\alpha$  et  $\beta$  est effectuée sur les spins qui constituent les deux super bloc  $\alpha'$  et  $\beta'$ . Nous avons ainsi  $N_{\text{sites}} \times N_{\text{sites}} = L^{2D}$  termes pour le membre de droite. Etant donné que la valeur moyenne dans l'expression précédente ne s'effectue que sur un super-bloc donné, et que l'ensemble des spins  $S_{\alpha}$  et  $S_{\beta}$  appartient à deux blocs différents, on peut simplifier son écriture en explicitant la moyenne du produit des spins, comme le produit des moyennes :

$$C'_{\alpha',\beta'} S'_{\alpha'} S'_{\beta'} = \sum_{\alpha \in \alpha', \beta \in \beta'} C_{\alpha,\beta} \langle S_{\alpha} \rangle_0 \langle S_{\beta} \rangle_0 \quad (3.29)$$

Il nous reste donc à calculer la moyenne  $\langle S \rangle_0$  de la valeur d'un spin dans une portion arbitraire du réseau. Une telle moyenne est définie pour l'expression (3.29) par :

$$\langle S_{\beta} \rangle_0 = \frac{\sum_{[S]} S_{\beta} \delta(S'_{\alpha'} - \text{signe}(\sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha})) \exp(-\beta h_0^{\alpha'})}{\sum_{[S]} \delta(S'_{\alpha'} - \text{signe}(\sum_{\alpha \in \alpha'} S_{\alpha})) \exp(-\beta h_0^{\alpha'})} \quad (3.30)$$

où  $\sum_{[S]} = \prod_{\alpha'} \sum_{[S]'}$ , il vient donc :

$$\begin{aligned} \langle S_\beta \rangle_0 &= \frac{\sum_{\beta \in \beta'} \sum_{S_\beta}^{N_{\text{spins}}} S_\beta \delta \left( S'_{\beta'} - \text{signe} \left( \sum_{\beta \in \beta'} S_\beta \right) \right) \exp \left( -\beta h_0^{\beta'} \right)}{\sum_{\beta \in \beta'} \sum_{S_\beta}^{N_{\text{spins}}} \delta \left( S'_{\beta'} - \text{signe} \left( \sum_{\beta \in \beta'} S_\beta \right) \right) \exp \left( -\beta h_0^{\beta'} \right)} \\ &= \frac{\sum_{[S]'} S_\beta \delta \left( S'_{\beta'} - \text{signe} \left( \sum_{\beta \in \beta'} S_\beta \right) \right)}{z_0^{\beta'}(S'_{\beta'})} \end{aligned} \quad (3.31)$$

c'est à dire la moyenne de la valeur du spin restreinte à un super-bloc en considérant seulement les configurations qui donnent la valeur du spin du super-bloc. Ceci correspond à la moyenne avec comme pondération la distribution qui correspond à  $z_0^{\alpha'}(S'_{\alpha'})$ . A priori nous ne connaissons pas la valeur de  $S'_{\alpha'}$ , donc cette expression est utile si et seulement si nous pouvons en donner une expression analytique valable pour toute valeur de  $S'_{\alpha'}$ , et l'on peut en déduire que :

$$\langle S \rangle_0 = \langle m(\beta, L) \rangle S'_{\alpha'} \quad (3.32)$$

où  $\langle m(\beta, L) \rangle$  est la valeur moyenne de l'aimantation du super bloc de spin considérée. Son évaluation dépend en générale de la topologie du modèle choisi ainsi que du nombre de spins  $N_{\text{spins}}$  considérés lorsque l'on forme un super bloc. Il est en générale très difficile de dériver une expression analytique pour  $\langle m(\beta, L) \rangle$ , et seuls quelques rares cas d'école, tels que le réseau triangulaire à deux dimensions permettent d'en déduire des expressions simples. Dans les autres cas, toutefois on pourra recourir à une évaluation numérique.

Il en découle que l'équation (3.29) peut se réécrire sous une forme plus transparente tel que :

$$C'_{\alpha', \beta'} = \langle m(\beta, L) \rangle^2 \sum_{\alpha \in \alpha', \beta \in \beta'} C_{\alpha, \beta} \quad (3.33)$$

où plus simplement comme :

$$C' = \langle m(\beta, L) \rangle^2 L^{2D} \langle C \rangle \quad (3.34)$$

où  $\langle C \rangle$  est la moyenne arithmétique des constantes de couplages entre deux super-blocs. Ce qui constitue la TGGR.

Cette procédure générale redonne, dans le cas particulier d'interactions ferromagnétiques entre proches voisins, des expressions connues dans la littérature pour les points critiques. En effet, si seules les couplages  $C_{\alpha, \beta}$  entre sites proches voisins sont non-nuls, l'équation (3.34) doit être réécrite comme :

$$C' = \langle m(\beta, L) \rangle^2 N_{\text{voisins}} C \quad (3.35)$$

où  $N_{\text{voisins}}$  est le nombre de spins proches voisins existant entre deux super-blocs. Pour le cas où les super-blocs ont une topologie cubique, on aura  $N_{\text{voisins}} = L^D$ . Dans le cadre de la théorie du groupe de renormalisation, les points critiques sont caractérisés par le fait que dans ces points, les couplages après un nombre suffisant d'étapes de renormalisation ne sont pas affectés par la TGR :

$$C_{\alpha, \beta}(\beta_C) = R[C_{\alpha, \beta}(\beta_C)] \quad (3.36)$$

ce qui est connu sous le nom de point fixe de renormalisation [44, 37, 45, 46, 47, 48, 49, 50]. En effet l'invariance des couplages sous renormalisation traduit l'invariance d'échelle du système au point critique. On obtient ainsi l'équation du point fixe pour la TGGR (interaction de portée infinie) :

$$|\langle m(\beta_C, L) \rangle| = \frac{1}{L^D} \quad (3.37)$$

ains que celle de la TGR (interaction entre proches voisins) :

$$|\langle m(\beta_C, L) \rangle| = \frac{1}{N_{\text{voisins}}^{1/2}} \quad (3.38)$$

Ces deux dernières équations constituent des lois d'échelle pour l'aimantation d'un super-bloc de spin. On peut remarquer qu'à la limite thermodynamique dans les deux cas l'aimantation tend vers zéro, comme il est attendu étant donnée que l'aimantation représente le paramètre d'ordre de la transition. Avant d'appliquer la TGGR au cas du modèle Ising-Star, nous allons tout d'abord revenir au cas d'école du réseau triangulaire en interaction à courte portée, et ceci afin d'illustrer le formalisme précédent.

### 3.3 Application de la TGR au cas du réseau triangulaire en interaction à courte portée.

Illustrons notre formalisme dans le cas d'un réseau triangulaire à deux dimensions, et considérons uniquement les interactions entre premiers voisins. Si l'on choisit de former des super-blocs de spins  $1/2$  à l'aide de 3 spins originels, on peut remarquer qu'à la nouvelle échelle les blocs de spins forment eux-mêmes un réseau triangulaire. Le nouveau réseau a juste tourné d'un angle de  $\frac{\pi}{6}$  par rapport au réseau de l'ancienne échelle, et le pas du réseau a été multiplié par un facteur  $3^{\frac{1}{2}}$ . En utilisant la relation (3.8), on obtient la longueur caractéristique qui va caractériser la TGR. On a donc  $N_{\text{sites}} = L^D$  où  $N_{\text{sites}} = 3$ ,  $L = 3^{\frac{1}{2}}$ , et  $D = 2$ . On peut également déterminer l'ensemble de  $N_{\text{conf}} = 2^3$  configurations possibles à

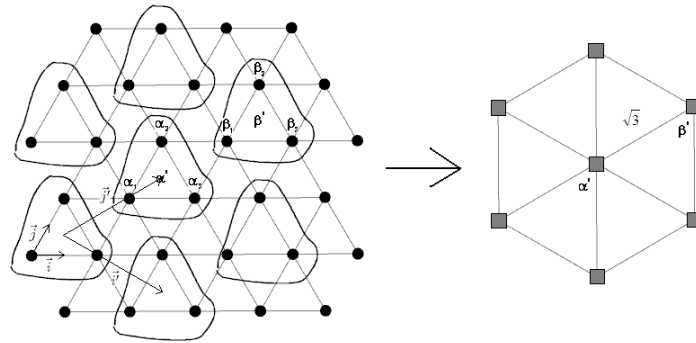


FIG. 3.1 – Image du réseau triangulaire avant, et après la procédure de renormalisation.

l'intérieur d'un super-bloc, ainsi que l'énergie intra-blocs correspondante  $H_0[S]$ . Il y aura donc  $N_{\text{conf}}/N_{\text{spin}} = 4$  configurations correspondant au super bloc de spin  $S'_{\alpha'} = +1$  et de même pour le super bloc de spin  $S'_{\alpha'} = -1$ . Ceci est illustré dans le tableau (3.1).

$S_{1\alpha}$	$S_{2\alpha}$	$S_{3\alpha}$	$S'_\alpha$	$\beta H_0$
1	1	1	1	$-3C_{1,0}$
-1	1	1	1	$C_{1,0}$
1	-1	1	1	$C_{1,0}$
1	1	-1	1	$C_{1,0}$
-1	-1	-1	-1	$-3C_{1,0}$
1	-1	-1	-1	$C_{1,0}$
-1	1	-1	-1	$C_{1,0}$
-1	-1	1	-1	$C_{1,0}$

TAB. 3.1 – Tableau récapitulant toutes les configurations possibles d'un super bloc de spin dans le cas du réseau triangulaire à deux dimensions. Pour chacune de ces configurations, on donne l'énergie d'interaction intra-bloc correspondante, ainsi que la valeur du super spin.

En utilisant la relations (3.18), il vient naturellement la fonction de partition à un bloc regie par :

$$z_0^\alpha = e^{C_{1,0}} + 3e^{-C_{1,0}} \quad (3.39)$$

et la fonction de partition  $Z_0$  :

$$Z_0 = (e^{C_{1,0}} + 3e^{-C_{1,0}})^{\frac{N}{3}} \quad (3.40)$$

On en déduit de même à l'aide de la relation (3.31), la valeur moyenne des spins d'un bloc  $\alpha'$ , qui dépende de la valeur du spin  $S'_{\alpha'}$  selon :

$$\langle S_{\alpha \in \alpha'} \rangle = \langle m(\beta, L) \rangle S'_{\alpha} \quad (3.41)$$

avec

$$\langle m(\beta, L) \rangle = \left( \frac{e^{3C_{1,0}} + e^{-C_{1,0}}}{e^{3C_{1,0}} + 3e^{-C_{1,0}}} \right) \quad (3.42)$$

On peut donc déterminer la relation qui donne les nouvelles constantes de couplages à la nouvelle échelle, dans l'approximation des cumulants au premier ordre :

$$C'_{1,0} = \left( \frac{e^{3C_{1,0}} + e^{-C_{1,0}}}{e^{3C_{1,0}} + 3e^{-C_{1,0}}} \right)^2 2C_{1,0} \quad (3.43)$$

où  $N_{\text{voisins}} = 2$ , ainsi que l'équation du point fixe  $C_{1,0}(\beta_C) = C_{1,0}^*$ , lorsque l'on se trouve à la température critique :

$$\left( \frac{e^{3C_{1,0}^*} + e^{-C_{1,0}^*}}{e^{3C_{1,0}^*} + 3e^{-C_{1,0}^*}} \right)^2 = \frac{1}{2} \quad (3.44)$$

ou aussi :

$$\begin{aligned} C_{1,0}^* &= \frac{1}{4} \ln(2\sqrt{2} + 1) \\ &= \beta_C J \end{aligned} \quad (3.45)$$



Après résolution, on en déduit que la température critique est donnée par  $T_C \simeq 2.979 \times J_{1,0}$ , ce qui constitue un meilleur résultat que celui obtenu à l'aide de la théorie de champ moyen. En effet en champ moyen on trouve  $T_C \simeq 6 \times J_{1,0}$ , alors que le résultat exact d'Onsager pour le réseau triangulaire à deux dimensions donne  $T_C \simeq 3.641 \times J_{1,0}$  [45]. Un développement au cumulants au deuxième ordre permettrait de s'approcher plus précisément de la valeur exacte de la température critique. On trouve dans la littérature [46, 47, 48]  $T_C \simeq 3.585 \times J_{1,0}$  pour le développement au deuxième ordre. Nous allons maintenant appliquer la TGGR pour le modèle Ising-Star, et vérifier numériquement que ce dernier n'admet pas de point fixe.

### 3.4 Application de la TGGR au modèle Ising Star.

Nous avons posé le formalisme de base, et illustré son application à l'aide du cas d'école précédent. Nous allons maintenant confirmer notre résultat Ising Star à l'aide de la TGGR. Étant donné que nous avons un réseau à trois dimensions, le plus petit bloc de spin que nous pouvons former sera constitué de 27 spins, soit  $2^{27}$  configurations possibles, ce qui constitue un dénombrement impossible à réaliser, si l'on souhaite obtenir des solutions analytiques comme pour le cas précédent. L'idée est donc de tester numériquement la loi d'échelle (3.37) pour le modèle Ising Star. Ce test consiste à calculer l'aimantation moyenne à la température limite pour différentes tailles de boîte en utilisant seulement l'interaction  $H_0$ . Ceci en pratique nécessite l'élimination des conditions aux bords périodiques ainsi que des répliques. Si la loi (3.37) est violée, cela voudra dire que l'on n'a pas de point fixe, et donc que le point terminal de la zone de coexistence n'est pas un point critique. La figure (3.2) montre clairement que la loi d'échelle est violée dans le cas du modèle Ising-Star. Il n'y a donc pas de point fixe pour le modèle Ising-Star, et par conséquent pas de phénomènes critiques. Nous reconfirmons donc nos résultats de finite-size scaling pour le modèle Ising Star à l'aide du groupe de renormalisation.

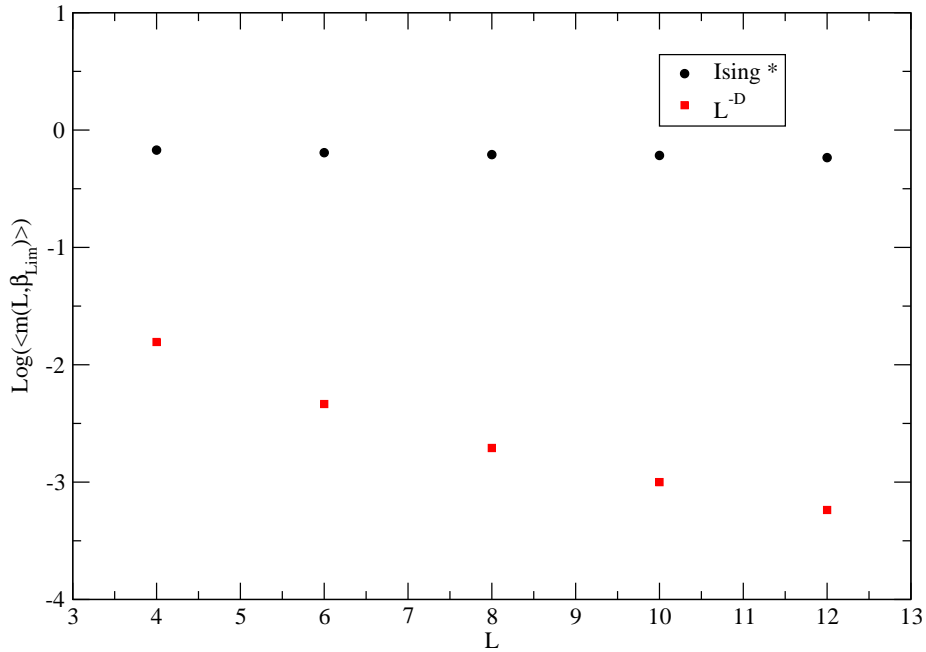


FIG. 3.2 – Evolution du logarithme de  $\langle m(\beta_C, L) \rangle$  pour différentes tailles de boîte. Les cercles pleins représentent le cas du modèle Ising-Star, et les carrés pleins la loi d'échelle (3.37). On remarque que la loi d'échelle est violée pour le modèle Ising-Star, et cela reconfirme les résultats de finite-size scaling.

### 3.5 Conclusion et perspectives.

Au cours de ce chapitre nous avons établi le formalisme de base de la TGGR applicable au système présentant des interactions de portées arbitraires. A l'aide de la TGGR nous avons pu vérifier que la loi d'échelle pour l'aimantation n'était pas vérifiée pour le modèle Ising-Star, confirmant ainsi sa non-appartenance à la classe d'universalité d'Ising. Une des perspective intéressante, sera de considérer un effet de polarisabilité des électrons du milieu. En effet si la polarisabilité n'est pas négligeable, le potentiel d'interaction Coulombienne devra tenir compte d'un terme d'écrantage, et il sera de type :

$$V(\vec{r}) \propto \frac{e^{-\lambda_r |\vec{r}|}}{|\vec{r}|} \quad (3.46)$$

où  $\lambda_r$  est la longueur d'écrantage qui devrait être déduite à partir de calculs microscopiques qui n'imposent pas l'homogénéité du gaz d'électrons [40]. Si  $\lambda_r \neq 0$ , l'interaction Coulombienne sera une interaction de portée finie. On peut pressentir à l'aide du groupe de renormalisation, qu'il existera à partir d'une certaine échelle uniquement des interactions entre proches voisins pour les super-blocs de spin. Cela devrait avoir pour conséquence l'apparition d'un point fixe, et donc la restauration d'un point critique. L'idée intéressante serait de refaire les calculs du modèle Ising-Star, mais en tenant compte du terme d'écrantage afin de vérifier notre intuition. Qualitativement on devrait retrouver la phénoménologie Ising habituelle. Le Hamiltonien d'interaction Coulombienne aurait pour seule conséquence de modifier la position du point critique. Si l'interaction (3.46) est couramment utilisée dans les calculs de dynamique moléculaire classique pour les étoiles à neutrons [8, 9], il est important de remarquer qu'il n'existe pour l'instant aucun modèle microscopique permettant de la valider. Au contraire, les calculs de champ moyen relativiste [14] ou non-relativiste [40] prévoient une polarisabilité négligeable pour les électrons, et qui à priori devrait diminuer à l'augmenter de la température. Ceci signifie que l'existence d'un point critique pour la matière d'étoile reste en tous les cas fortement spéculative.

# Chapitre 4

## Le modèle FMD.

### 4.1 Introduction.

Lors des deux chapitres précédents nous avons étudié la thermodynamique de la croûte des proto-étoiles à neutrons avec une approche Ising. Nous en avons déduit que l'interaction Coulombienne a une influence importante sur cette dernière, dont le résultat le plus important est l'absence de phénomènes critiques au point de transition. Néanmoins l'ensemble de ces résultats est purement qualitatif, et ils ont été obtenus dans un modèle classique, où l'interaction nucléaire a été simulée à l'aide d'une interaction entre proches voisins. On a donc besoin d'un modèle réaliste, si l'on souhaite obtenir des prédictions quantitatives. La thermodynamique exacte des systèmes de fermions en interactions étant irréalisable, on peut toujours employer des approches utilisant certaines approximations. La thermodynamique de la matière d'étoile a déjà été étudiée à l'aide d'une approche de type Hartree-Fock [51, 52], mais elle décrit cette dernière comme une matière homogène, et nous avons vu dans les chapitres précédent que ce n'était pas le cas si l'on est à des densités inférieures à la densité de saturation  $\rho_0$ .

Afin de calculer la thermodynamique de la matière d'étoile tout en tenant compte des fluctuations de densité, d'autres approches ont été proposés par l'intermédiaire de modèles dépendants du temps utilisant le théorème ergodique. C.J. Horowitz a utilisé un modèle de dynamique moléculaire classique, plus connue sous le nom de CMD (Classical Molecular Dynamics), qui résout les équations de Newton pour un système de particules ponctuelles en interaction. Ce modèle est employé dans de nombreuses branches de la physique [53, 54, 55], où le domaine de validité est la mécanique classique. Il est par exemple intensément utilisé en mécanique céleste, et dans certains problèmes de physique de l'état solide où la mécanique classique est une excellente approximation. G. Watanabe et *al.* ont de leur côté utilisé une approche de dynamique moléculaire quantique plus connue sous le nom de QMD (Quantum Molecular Dynamics). Ce modèle repose sur le fait que chaque particule est approximée par un paquet d'onde gaussien dont l'évolution temporelle du centroïde est donnée en résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le modèle QMD a connu de nombreux succès aussi bien en physique moléculaire, en physique de la matière condensée, qu'en physique nucléaire [56]. Néanmoins malgré son nom, il s'agit d'un modèle essentiellement classique où certains des degrés de liberté tel que les largeurs des gaussiennes ou le spin des particules ont été figés. Les équations de mouvement sont les équations de Hamilton pour un ensemble de points dans l'espace des phases exactement comme dans le cas CMD. Toutefois il a été agrémenté d'un cer-

tain nombre d'ingrédients phénoménologiques adaptés à la physique nucléaire, tel que l'intégrale de collision de Uhling-Uehlenbeck pour simuler les coeurs dur de l'interaction nucléaire. De plus si l'on souhaite décrire des systèmes de fermions l'antisymétrisation de la fonction d'onde n'est pas respectée, et le principe d'exclusion de Pauli est ajouté à la main en incluant un potentiel dépendant de l'impulsion, qui va simuler cet effet de manière approximative. On pourrait donc penser qu'utiliser le modèle Hartree-Fock dépendant du temps plus connu sous le nom de modèle TDHF (Time Dependant Hartree Fock) [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63] serait une excellente solution à notre problème, pour aller au delà des approches classique et semi-classique présentées précédemment. Le modèle TDHF donne l'évolution dynamique en champ moyen de la densité, et il est à l'heure actuelle l'un des modèles dynamiques les plus utilisés en physique nucléaire. Il permet une très bonne description des modes collectifs dans les noyaux, ainsi que des collisions nucléaires à très basse énergie. Néanmoins ce dernier ne propage pas les fluctuations de densité, ce qui constitue un énorme problème si l'on souhaite étudier la transition liquide-gaz, et les phases pasta dans les étoiles. L'introduction des fluctuations de densité nécessiterait l'implémentation d'un mouvement stochastique dans les équation de mouvement du modèle TDHF, mais les calculs restent irréalisables pour notre époque [64, 65, 66]. Une solution possible est d'utiliser une approche dynamique quantique basée sur un principe variationnel, où l'on imposerait les degrés de liberté importants qui nous intéressent, c'est à dire la possibilité de localiser les particules afin de produire des fluctuations de densité. Au début des années'80, S. Drożdż *et al.* et B. Caurier *et al.* ont proposé un premier modèle permettant de décrire des systèmes de fermions [67, 68], plus connu sous le nom de modèle TDCM (Time Dependent Cluster Model). Ce dernier a été raffiné au début des années'90, et deux nouveaux modèles de dynamique moléculaire on ainsi vu le jour. L'un est le modèle de dynamique moléculaire fermionique proposé par H. Feldmeier, plus connu sous le nom de modèle FMD (Fermionic Molecular Dynamics) [20, 21, 22], et l'autre le modèle de dynamique moléculaire anti-symétrisé proposé par H. Horiuchi *et al* [69, 70] dit modèle AMD (Antisymmetrized Molecular Dynamics). Les ingrédients de base sont similaires au modèle QMD, sauf que pour ces deux derniers, les équations de mouvement décrivent l'évolution temporelle de paquets d'onde gaussiens, dont la fonction d'onde totale est anti-symétrisée afin de tenir compte du principe d'exclusion de Pauli de manière exacte. Les modèles FMD et AMD sont très semblables, mais quelques points les différencient. En ce qui concerne le modèle FMD, les largeurs des paquets d'onde gaussiens peuvent évoluer dynamiquement au cours du temps. De plus, les degrés de libertés liés au spin sont également pris en compte. Il a aussi été proposé une version du modèle FMD incluant un corrélateur à deux corps, afin de propager des corrélations quantiques. Néanmoins l'implémentation numérique du corrélateur constitue un effort numérique assez important, surtout si l'on souhaite étudier des systèmes constitués d'un très grand nombre de particules. L'ensemble des ingrédients cités précédemment n'est pas pris en compte pour le modèle AMD, mais le fait de restreindre l'évolution dynamique des largeurs des gaussiennes permet d'introduire un mouvement stochastique aux particules. De plus, le modèle AMD a été raffiné par l'ajout d'une intégrale de collision entre particules, qui constitue une deuxième source de stochasticité. Les modèles FMD et AMD ont été intensément utilisés en physique nucléaire [71, 72, 73, 74, 75], et ont connu d'énormes succès aussi bien dans la description de certains mécanismes de réaction tel que les réactions de multifragmentation [76, 77, 78, 79, 80, 81], ou dans la description de la structure des noyaux [22, 75]. Bien qu'ils n'aient jamais été utilisés en dehors de la physique nucléaire, ils ne sont pas en

principe restreints à ce domaine de recherche, et pourraient être employés par exemple pour traiter des problèmes de matière condensée. L'approche que nous souhaitons utiliser pour décrire la thermodynamique de la matière d'étoile se basera sur le modèle FMD dans sa formulation originelle, c'est à dire sans corrélateur. Le but de ce chapitre sera de présenter en détail le formalisme de base du modèle FMD. Nous démontrerons également qu'il existe une connexion non triviale entre le modèle FMD, et le modèle TDHF. Enfin contrairement au modèle AMD existant qui utilise une interaction nucléaire de type "Gogny" [82, 83], nous formaliserons notre modèle à l'aide d'une interaction nucléaire de type "Skyrme" [84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99]. Nous verrons que le fait de reformuler le modèle FMD dans un formalisme Skyrme Hartree-Fock, peut présenter de nombreux avantages par rapport à la formulation originelle de H. Feldmeier si l'on souhaite effectuer des calculs à très grand nombre de particules. Enfin nous terminerons ce chapitre par des tests numériques permettant de valider notre modèle.

## 4.2 Présentation du modèle FMD.

Pour ce sous-chapitre nous reprenons la dérivation des références [20, 21, 22, 71, 72].

### 4.2.1 Principe variationnel dépendant du temps.

Le modèle FMD se propose de résoudre dans la meilleure approximation possible l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un système de fermions en interactions, dont la fonction d'onde total du système doit être anti-symétrisée. Nous considérerons la forme générale de l'équation des ondes :

$$i \frac{d}{dt} |Q(t)\rangle = \hat{H} |Q(t)\rangle \quad (4.1)$$

où  $\hat{H}$  est le Hamiltonien total du système, et  $|Q(t)\rangle$  la fonction d'onde de l'état à N-corps qui est uniquement fonction d'un jeu de paramètres dépendants du temps  $Q(t) = [q_\mu(t) | \mu = 1, 2, \dots]$ . Nous préciserons par la suite le nombre exact, et la nature de chacun d'entre eux. En partant de l'équation (4.1), on peut former une action définie entre un intervalle de temps  $t_1$  et  $t_2$  par :

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | Q(t) \rangle \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L} (Q(t), \dot{Q}(t)) \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec  $\mathcal{L}$  la fonction de Lagrange du système donnée par :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} (Q(t), \dot{Q}(t)) &= \langle Q(t) | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | Q(t) \rangle \\ &= \mathcal{L}_0 (Q(t), \dot{Q}(t)) - \mathcal{H} (Q(t)) \end{aligned} \quad (4.3)$$

où l'on peut définir la dérivée temporelle du jeu de paramètres  $Q(t)$  comme  $\dot{Q}(t) = [dq_\mu(t)/dt | \mu = 1, 2, \dots]$ .  $\mathcal{H}$  est la valeur moyenne du Hamiltonien du système :

$$\mathcal{H} (Q(t)) = \langle Q(t) | \hat{H} | Q(t) \rangle \quad (4.4)$$

et  $\mathcal{L}_0$  est une quantité spécifiée par :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_0(Q(t), \dot{Q}(t)) &= \langle Q(t) | i\hbar \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle \\
 &= \sum_{\mu} \langle Q(t) | i\hbar \frac{d}{dq_{\mu}} | Q(t) \rangle \dot{q}_{\mu} \\
 &= \sum_{\mu} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_{\mu}} \dot{q}_{\mu}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Nous considérons que les paramètres  $q_{\mu}$  sont réels dans toute la suite de l'exposé. Le modèle FMD est basé sur un principe variationnel dépendant du temps qui repose sur le fait, que l'on doit minimiser l'action  $S$ ,  $\delta S = 0$ . Ceci caractérise le chemin d'espace-temps minimum suivi, parmi tous ceux joignant  $Q(t_1)$  et  $Q(t_2)$ . On peut remarquer que si la fonction d'onde globale n'est pas contrainte à être réduite sous une forme paramétrique, on retrouve l'équation de Schrödinger sans approximation.

On obtient dans un premier temps la variation infinitésimale de l'action  $S$  tel que :

$$\begin{aligned}
 \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L}(Q(t), \dot{Q}(t)) \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\mu}} \delta q_{\mu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{\mu}} \delta \dot{q}_{\mu} \right]
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

et à l'aide d'une intégration par partie il vient :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\mu}} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{\mu}} \right) \right] \delta q_{\mu} \tag{4.7}$$

Sachant qu'elle doit répondre à un extremum, nous pouvons voir que le principe variationnel est exactement équivalent aux équations de Euler-Lagrange pour chacun des paramètres  $q_{\mu}$  où :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\mu}} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{\mu}} \right) \tag{4.8}$$

On va donc pouvoir déterminer à l'aide de l'équation (4.8), les équations qui donnent l'évolution temporelle des différents paramètres  $q_{\mu}$ . En utilisant l'équation (4.3), tout en sachant que le Hamiltonien est une fonction dépendante uniquement des paramètres  $q_{\mu}$ , on peut réduire le membre de droite de l'équation (4.8) par :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{\mu}} &= \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_{\mu}} \\
 &= \sum_{\nu} \dot{q}_{\nu} \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_{\mu} \partial q_{\nu}}
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

et de même pour le membre de gauche :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\mu}} &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial q_{\mu}} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\mu}} \\
 &= \sum_{\nu} \dot{q}_{\nu} \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial q_{\mu} \partial \dot{q}_{\nu}} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\mu}}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

En utilisant les relations (4.9) et (4.10), l'équation d'Euler-Lagrange se réécrit simplement sous la forme suivante :

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\mu} = \sum_\nu \dot{q}_\nu \mathcal{A}_{\mu\nu} \quad (4.11)$$

Les éléments de matrice  $\mathcal{A}_{\mu\nu}$  sont définis par :

$$\mathcal{A}_{\mu\nu} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\mu \partial q_\nu} - \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\nu \partial q_\mu} \quad (4.12)$$

tout en remarquant que la matrice  $\mathcal{A}$  est une matrice anti-symétrique :

$$\mathcal{A}_{\mu\nu} = -\mathcal{A}_{\nu\mu} \quad (4.13)$$

Si la matrice  $\mathcal{A}$  est non singulière, on peut déterminer l'ensemble des équations différentielles couplées qui donnent l'évolution des différents paramètres  $q_\mu$  tel que :

$$\dot{q}_\mu = - \sum_\nu \mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu} \quad (4.14)$$

### 4.2.2 Choix des états à une particule et construction de la fonction d'onde globale du système.

Jusqu'à présent, nous n'avons donné que les équations d'évolutions des différents paramètres qui constituent la fonction d'onde globale du système. Nous n'avons supposé aucune condition particulière pour cette dernière, ainsi que pour les états à une particule qui peuvent la constituer. Commençons tout d'abord à définir nos états à une particule qui seront choisis comme étant des gaussiennes dépendant de paramètres dynamiques, où la projection en représentation  $|\vec{r}\rangle$  est donnée par :

$$\langle \vec{r} | q_k(t) \rangle = \exp \left( - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k(t))^2}{2a_k(t)} \right) |\chi_k(t), \phi_k(t)\rangle |m_t(k)\rangle \quad (4.15)$$

$|\chi_k(t), \phi_k(t)\rangle$  est le vecteur d'onde de spin 1/2 des particules dans l'espace des états de spin à deux dimensions, où  $\chi_k(t)$  et  $\phi_k(t)$  sont les deux phases dépendantes du temps qui décrivent l'évolution dynamique du spin dans cet espace tel que :

$$|\chi_k(t), \phi_k(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \left( \frac{\chi_k(t)}{2} \right) \\ \sin \left( \frac{\chi_k(t)}{2} \right) e^{i\phi_k(t)} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

où :

$$\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle = \cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \cos \left( \frac{\chi_l}{2} \right) + \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \quad (4.17)$$

Le ket  $|m_t(k)\rangle$  représente le degré de liberté lié à l'isospin, et l'on considérera qu'il n'y aura pas de recouvrement entre deux particules d'espèce différente avec :

$$\langle m_t(k) | m_t(l) \rangle = 2 \left( \frac{1}{4} + m_k m_l \right), \quad m_t = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{pour les protons,} \\ -\frac{1}{2} & \text{pour les neutrons.} \end{cases} \quad (4.18)$$



Le paramètre dynamique  $a_k(t)$  constitue la largeur complexe de la gaussienne. Le paramètre  $\vec{b}_k(t)$  représente un vecteur complexe dans l'espace à trois dimensions. En combinant les parties réels et imaginaires de ces deux derniers éléments, on peut définir la position du centroïde de la gaussienne :

$$\begin{aligned}\vec{r}_k(t) &= \frac{\langle q_k(t) | \hat{\vec{r}} | q_k(t) \rangle}{\langle q_k(t) | q_k(t) \rangle} \\ &= \text{Re} \left( \vec{b}_k(t) \right) + \frac{\text{Im} (a_k(t))}{\text{Re} (a_k(t))} \text{Im} \left( \vec{b}_k(t) \right)\end{aligned}\quad (4.19)$$

ainsi que son impulsion :

$$\begin{aligned}\vec{p}_k(t) &= \frac{\langle q_k(t) | \hat{\vec{p}} | q_k(t) \rangle}{\langle q_k(t) | q_k(t) \rangle} \\ &= \frac{\text{Im} \left( \vec{b}_k(t) \right)}{\text{Re} (a_k(t))}\end{aligned}\quad (4.20)$$

On peut remarquer que les états à une particule peuvent ainsi s'exprimer en termes des coordonnées physiques par :

$$\langle \vec{r} | q_k(t) \rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r} - \vec{r}_k(t))^2}{2a_k(t)} + i\vec{r} \cdot \vec{p}_k(t) + i\eta(t) \right) |\chi_k(t), \phi_k(t)\rangle |m_t(k)\rangle \quad (4.21)$$

où  $\eta(t)$  est une phase dépendante du temps. Pour chaque gaussienne on a donc un total de dix paramètres réels dépendants du temps, dont l'équation de mouvement est donnée par la relation (4.14). On conviendra de prendre par la suite comme notation pour les paramètres  $q_\mu$ , l'indice greque  $\mu = \{m, i\}$  où  $i$  représente l'un des dix paramètres de la particule  $m$ . Le fait de choisir des paquets d'onde gaussiens permet de localiser les états à une particule dans l'espace des phases. Néanmoins on peut définir la variance sur la position de chacune des particules :

$$\begin{aligned}3\Delta r_k^2(t) &= \frac{\langle q_k(t) | \left( \hat{\vec{r}} - \vec{r}_k(t) \right)^2 | q_k(t) \rangle}{\langle q_k(t) | q_k(t) \rangle} \\ &= \frac{3}{2} \frac{\text{Re} (a_k(t))^2 + \text{Im} (a_k(t))^2}{\text{Re} (a_k(t))}\end{aligned}\quad (4.22)$$

ainsi que sur leurs impulsions :

$$\begin{aligned}3\Delta p_k^2(t) &= \frac{\langle q_k(t) | \left( \hat{\vec{p}} - \vec{p}_k(t) \right)^2 | q_k(t) \rangle}{\langle q_k(t) | q_k(t) \rangle} \\ &= \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{\text{Re} (a_k(t))}\end{aligned}\quad (4.23)$$

Le produit des deux dernières relations donne une relation d'incertitude liant les positions et les impulsions des paquets d'onde gaussiens :

$$\Delta r_k^2(t) \Delta p_k^2(t) = \frac{\hbar^2}{4} \left( 1 + \frac{\text{Im} (a_k(t))^2}{\text{Re} (a_k(t))^2} \right) \quad (4.24)$$

où le minimum d'incertitude est obtenu lorsque la partie imaginaire de la gaussienne est nulle. Chaque paquet d'onde gaussien occupera donc un volume supérieur à  $(\hbar/2\pi)^3$  dans l'espace des phases. On vérifie donc à l'aide de l'équation précédente la relation d'incertitude de Heisenberg pour les paquets d'onde gaussiens tel que :

$$\Delta r_k(t) \Delta p_k(t) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.25)$$

Après avoir défini l'ensemble de la paramétrisation des états à une particule, nous pouvons donner l'expression de la fonction d'onde globale du système. Etant donné que nous cherchons à décrire un système de fermions, l'ansatz le plus simple est un produit anti-symétrisé de paquets d'onde gaussiens :

$$|\tilde{Q}(t)\rangle = \frac{\hat{\mathcal{A}}}{A!} \prod_k^A |q_k(t)\rangle \quad (4.26)$$

où  $\hat{\mathcal{A}}$  est un opérateur d'anti-symétrisation, et A le nombre de particules.  $|\tilde{Q}(t)\rangle$  étant la fonction d'onde globale du système non normalisée. Il conviendra de travailler avec une fonction d'onde normalisée :

$$|Q(t)\rangle = \frac{1}{\langle \tilde{Q}(t) | \tilde{Q}(t) \rangle^{1/2}} |\tilde{Q}(t)\rangle \quad (4.27)$$

où la norme de l'état à N-corps est donnée par :

$$\langle \tilde{Q}(t) | \tilde{Q}(t) \rangle = \frac{1}{A!} \det (\langle q_k | q_l \rangle) \quad (4.28)$$

où  $\langle q_k | q_l \rangle$  est le recouvrement entre deux gaussiennes, que nous allons expliciter dans la prochaine sous-partie.

### 4.2.3 Construction de l'opérateur densité à un corps et de ses dérivées.

Après avoir défini les états à une particule ainsi que la fonction d'onde de notre système, nous pouvons construire l'opérateur densité à un corps qui nous sera utile par la suite, et en particulier lorsque l'on cherchera à exprimer des valeurs moyennes d'observables dépendantes d'opérateurs à un corps. Il est important de remarquer que notre base de gaussiennes ne constitue pas une base orthonormée, et cela peut poser certains problèmes. En effet il existe un recouvrement non nul entre deux états à une particule, où les éléments de la matrice de recouvrement  $O^{-1}$  sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle q_k | q_l \rangle &= \left( 2\pi \frac{a_k^* a_l}{a_k^* + a_l} \right)^{3/2} \exp \left( - \frac{(\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)^2}{2(a_k^* + a_l)} \right) \langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle \langle m_t(k) | m_t(l) \rangle \\ &= O_{kl}^{-1} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Il est toutefois toujours possible de réexprimer les états gaussiens dans une base orthonormée  $|\psi_m(t)\rangle$  où :

$$\langle \psi_m(t) | \psi_n(t) \rangle = \delta_{mn} \quad (4.30)$$

Le passage de la base gaussienne vers cette base orthonormée s'effectue à l'aide d'une matrice de passage  $\Omega$  tel que :

$$|\psi_m(t)\rangle = \sum_{i=1}^A \Omega_{mi}(t) |q_i(t)\rangle \quad (4.31)$$

et réciproquement :

$$|q_i(t)\rangle = \sum_{m=1}^A \Omega_{im}^{-1}(t) |\psi_m(t)\rangle \quad (4.32)$$

Dans une base orthonormée, l'opérateur densité à un corps est défini de façon standard comme le projecteur sur les états occupés :

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{m=1}^A |\psi_m(t)\rangle \langle \psi_m(t)| \quad (4.33)$$

où l'on peut en déduire facilement que :

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad \text{et} \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad (4.34)$$

L'équation (4.31) va nous permettre de trouver l'expression de  $\hat{\rho}$  dans la base de gaussiennes, qui constitue la base dans laquelle nous travaillons, puisque nous connaissons les équations d'évolution des paramètres dans cette dernière. Pour cela, il nous faut exprimer les éléments de matrice de recouvrement en fonction des éléments de la matrice de passage. A l'aide de l'expression (4.32) on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle q_j(t) | q_i(t) \rangle &= \sum_{m=1}^A \sum_{n=1}^A \Omega_{jn}^{\dagger-1}(t) \Omega_{im}^{-1}(t) \langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle \\ &= \sum_{m=1}^A \Omega_{jm}^{\dagger-1}(t) \Omega_{im}^{-1}(t) \end{aligned} \quad (4.35)$$

La matrice de recouvrement  $O^{-1}$  est donc reliée à la matrice de passage  $\Omega$  par la relation :

$$O^{-1} = (\Omega \Omega^\dagger)^{-1} \quad (4.36)$$

et il en découle que la matrice inverse de la matrice de recouvrement est donnée par :

$$O = \Omega \Omega^\dagger \quad (4.37)$$

où l'on peut ainsi définir la relation :

$$\sum_{n=1}^A \langle q_k | q_n \rangle O_{nl} = \delta_{kl} \quad (4.38)$$

On peut également remarquer que la matrice de recouvrement ainsi que son inverse sont des matrices Hermitiques. En partant des expressions (4.33) et (4.31), il vient :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_{m=1}^A |\psi_m(t)\rangle \langle \psi_m(t)| \\ &= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A |q_k(t)\rangle \langle q_l(t)| \sum_{m=1}^A \Omega_{km}(t) \Omega_{lm}^\dagger(t) \end{aligned} \quad (4.39)$$

et en utilisant la relation (4.37), il en découle l'expression de l'opérateur densité à un corps dans la base de gaussiennes :

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A |q_k(t)\rangle O_{kl}(t) \langle q_l(t)| \quad (4.40)$$

Une autre quantité intéressante à exprimer est la dérivée de l'opérateur densité à un corps par rapport aux différents paramètres dynamiques. Cette dernière nous sera très utile lorsque l'on aura à calculer les dérivées des valeurs moyennes d'observables. En dérivant l'expression précédente par rapport à  $q_\mu$ , il vient dans un premier temps :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial q_\mu} &= \sum_{l=1}^A \left| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml}(t) \langle q_l(t)| + \sum_{k=1}^A |q_k\rangle O_{km}(t) \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right| \\ &+ \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A |q_k(t)\rangle \frac{\partial O_{kl}(t)}{\partial q_\mu} \langle q_l(t)| \end{aligned} \quad (4.41)$$

où l'expression de la dérivée des éléments de la matrice  $O$  restent encore à déterminer. En dérivant la relation (4.38) par rapport à  $q_\mu$  nous obtenons :

$$\sum_{n=1}^A \delta_{mk} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_n \right\rangle O_{nl} + \left\langle q_k \middle| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml} + \sum_{n=1}^A \langle q_k | q_n \rangle \frac{\partial O_{nl}(t)}{\partial q_\mu} = 0 \quad (4.42)$$

Si l'on multiplie cette expression par l'élément de matrice  $O_{tk}$ , et l'on somme sur l'indice  $k$ , il vient :

$$\sum_{k=1}^A \sum_{n=1}^A O_{tk} \langle q_k | q_n \rangle \frac{\partial O_{nl}(t)}{\partial q_\mu} = - \sum_{n=1}^A O_{tm} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_n \right\rangle O_{nl} - \sum_{k=1}^A O_{tk} \left\langle q_k \middle| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml} \quad (4.43)$$

et en réutilisant la relation (4.38), on obtient :

$$\frac{\partial O_{tl}(t)}{\partial q_\mu} = - \sum_{n=1}^A O_{tm} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_n \right\rangle O_{nl} - \sum_{k=1}^A O_{tk} \left\langle q_k \middle| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml} \quad (4.44)$$

En insérant cette dernière expression dans l'équation (4.41), on en déduit l'expression finale de la dérivée par rapport aux paramètres  $q_\mu$ , de l'opérateur densité à un corps :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial q_\mu} &= \sum_{l=1}^A \left| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml}(t) \langle q_l(t)| + \sum_{k=1}^A |q_k\rangle O_{km}(t) \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right| \\ &- \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A |q_k(t)\rangle \sum_{n=1}^A \left[ O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_n \right\rangle O_{nl} + O_{kn} \left\langle q_n \middle| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right\rangle O_{ml} \right] \langle q_l(t)| \end{aligned} \quad (4.45)$$

où l'ensemble des dérivées des éléments de la matrice de recouvrement, ainsi que ceux des états à une particule dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  se trouvent dans les annexes (A.3) et (A.4). Nous avons à présent les deux principaux ingrédients essentiels pour évaluer l'expression de la valeur moyenne d'une observable à un corps, ainsi que de ses dérivées. Nous allons dans un premier temps, exprimer ces deux types de quantités dans le cas général, et nous prendrons comme exemple l'énergie cinétique du système de fermions.

#### 4.2.4 Expression de la valeur moyenne d'une observable à un corps ainsi ses dérivées.

Au cour de cette sous-partie, nous donnerons l'expression de la valeur moyenne d'une observable à un corps ainsi que ses dérivées dans la base de gaussiennes. Considérons le Hamiltonien d'une observable à un corps dans le cas général :

$$\hat{H}_{1\text{-corps}} = \sum_{i=1}^A \hat{a}_i \quad (4.46)$$

La valeur moyenne de  $\mathcal{H}_{1\text{-corps}}$  s'exprime comme la trace du produit de l'opérateur à un corps, par l'opérateur densité :

$$\mathcal{H}_{1\text{-corps}} = \text{Tr}(\hat{a}\hat{\rho}) \quad (4.47)$$

En inserant l'expression (4.40) dans cette dernière, il vient :

$$\mathcal{H}_{1\text{-corps}} = \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle q_k | \hat{a} | q_l \rangle O_{lk} \quad (4.48)$$

Il est aussi intéressant d'évaluer la dérivée de cette valeur moyenne qui rentre en compte dans la relation (4.14), et qui détermine les équations de mouvement des paramètres des gaussiennes. Nous devons tout d'abord exprimer :

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{1\text{-corps}}}{\partial q_\mu} = \text{Tr} \left( \hat{a} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \quad (4.49)$$

En développant la trace, et en insérant la relation (4.45) qui donne la dérivée par rapport aux paramètres de l'opérateur densité à un corps, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{H}_{1\text{-corps}}}{\partial q_\mu} &= \sum_{l=1}^A \left\langle q_l \left| \hat{a} \left| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right. \right. \right\rangle O_{ml} + \sum_{k=1}^A O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \left| \hat{a} \right| q_k \right\rangle \\ &\quad - \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle q_l | \hat{a} | q_k \rangle \sum_{n=1}^A \left[ O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \left| q_n \right. \right\rangle O_{nl} + O_{kn} \left\langle q_n \left| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right. \right\rangle O_{ml} \right] \\ &= 2 \sum_{k=1}^A \text{Re} \left[ O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \left| \hat{a} \right| q_k \right\rangle - \sum_{l=1}^A \langle q_l | \hat{a} | q_k \rangle \sum_{n=1}^A O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \left| q_n \right. \right\rangle O_{nl} \right] \end{aligned} \quad (4.50)$$

où l'ensemble des éléments de matrice de l'opérateur  $\hat{a}$  ainsi que ses dérivées exprimées dans la base de gaussiennes, sont donnés dans les annexes (A.3) et (A.4). L'un des exemples les plus simples est le cas du Hamiltonien d'énergie cinétique donné par :

$$\hat{H}_{\text{Cin}} = \sum_{i=1}^A \hat{t}_i = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \quad (4.51)$$

L'ensemble des éléments de matrice pour l'opérateur  $\hat{t}$  ainsi que leurs dérivées sont donnés dans l'annexe (A.5). Nous avons ainsi tous les éléments nous permettant de résoudre les

équations de mouvement d'un système de fermions sans interaction. Néanmoins toutes les observables ne sont pas toutes à un corps. Si le système est en interaction, on aura très naturellement des moyennes d'observables à deux corps en commençant par l'énergie. Ces dernières s'obtiennent en principe avec la même démarche en introduisant l'opérateur densité à deux corps défini par :

$$\hat{\rho}^{(2)}(t) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \sum_{m=1}^A \sum_{n=1}^A |q_k(t)q_l(t)\rangle_a O_{km}(t) O_{ln}(t) \langle q_m(t)q_n(t)| \quad (4.52)$$

où l'on a pris pour notation :

$$\begin{aligned} |q_k(t)q_l(t)\rangle &= |q_k\rangle \otimes |q_l(t)\rangle \\ |q_k(t)q_l(t)\rangle_a &= |q_k\rangle \otimes |q_l(t)\rangle - |q_l\rangle \otimes |q_k(t)\rangle \end{aligned} \quad (4.53)$$

ce qui donne par exemple pour la valeur moyenne de l'opérateur à deux corps  $\hat{V}$  la relation suivante :

$$\begin{aligned} \langle Q(t) | \hat{V} | Q(t) \rangle &= \text{Tr} (\hat{v} \hat{\rho}^{(2)}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \sum_{m=1}^A \sum_{n=1}^A \langle q_m(t)q_n(t) | \hat{v} | q_k(t)q_l(t) \rangle_a O_{km}(t) O_{ln}(t) \end{aligned} \quad (4.54)$$

L'ensemble des détails concernant les valeurs moyennes d'opérateurs à deux corps, ainsi que leurs dérivées sont données dans la référence [22]. Les modèles AMD et FMD existants utilisent l'opérateur densité à deux corps pour le calcul de l'interaction Coulombienne, ainsi que celui de l'interaction nucléaire. Cela implique que la complexité de ce type de modèle croît comme le nombre de particules à la puissance quatre. Le temps de calcul croît donc d'une manière assez significative, si l'on souhaite réaliser des calculs pour des systèmes constitués d'un très grand nombre de particules, tel que des ions lourds, ou de la matière d'étoile. Le modèle FMD que nous nous proposons de construire devra contourner cette difficulté, et n'utiliser que l'opérateur densité à un corps, de tel sorte à n'avoir qu'une complexité croissante comme le nombre de particules au carré. Pour ce faire nous utiliserons la connexion théorique entre le modèle FMD et le modèle TDHF, qui fera l'objet de la suite de ce chapitre.

### 4.3 Connexion avec le modèle TDHF.

Nous allons voir que résoudre les équations de mouvement du modèle FMD est exactement équivalent à résoudre celles du modèle TDHF [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63], avec la restriction additionnelle, que la fonction d'onde soit un déterminant de Slater de gaussiennes défini par la relation (4.27). En effet si la fonction d'onde globale de notre système est un déterminant de Slater, la valeur moyenne du Hamiltonien  $\hat{H}$  peut être exprimée comme une fonctionnelle de l'opérateur densité à un corps :

$$\mathcal{H} = E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] \quad (4.55)$$

où  $\hat{\tau}$  est l'opérateur densité d'énergie cinétique donné par :

$$\hat{\tau} = \hat{\vec{p}} \hat{\rho} \hat{\vec{p}} \quad (4.56)$$

L'équation (4.6) qui minimise l'action peut ainsi se réécrire avec (4.3), sous une forme légèrement différente :

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L} \left( Q(t), \dot{Q}(t) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \delta \mathcal{L}_0(t) - \delta E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] \right) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Le premier terme de l'équation (4.57) est donné par :

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L}_0(t) = i\hbar \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \langle \delta Q(t) | \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle + \langle Q(t) | \frac{d}{dt} | \delta Q(t) \rangle \right) \tag{4.58}$$

La dérivation de l'équation précédente sera plus simple, si l'on exprime le vecteur d'onde sur une base orthonormée. On pourra toujours revenir à la base de gaussiennes avec (4.32), ce qui signifie que poser  $|Q(t)\rangle = \hat{A} \prod_{m=1}^A |\psi_m(t)\rangle$  ne conduit pas à une perte de généralité. A l'aide d'une intégration par parties nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L}_0(t) &= i\hbar \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \langle \delta Q(t) | \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle - \frac{d}{dt} (\langle Q(t) |) | \delta Q(t) \rangle \right) \\
&= i\hbar \sum_{m=1}^A \int_{t_1}^{t_2} dt \left( \langle \delta \psi_m(t) | \frac{d}{dt} | \psi_m(t) \rangle - \frac{d}{dt} (\langle \psi_m(t) |) | \delta \psi_m(t) \rangle \right)
\end{aligned} \tag{4.59}$$

Le second terme dans l'équation (4.57) peut s'exprimer comme la trace d'un opérateur à un corps fonction de l'opérateur densité à un corps, et de sa différentielle :

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} dt \delta E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{m=1}^A \sum_{n=1}^A \left( \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t)]}{\partial \rho_{mn}} \delta \rho_{mn}(t) + \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)]}{\partial \tau_{mn}} \delta \tau_{mn}(t) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)]}{\partial \rho^T} \delta \hat{\rho}(t) + \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)]}{\partial \tau^T} \delta \hat{\tau}(t) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \hat{u}[\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\rho}(t) + \frac{\hbar^2}{2m^*} [\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\tau}(t) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \hat{h}[\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\rho}(t) \right)
\end{aligned} \tag{4.60}$$

avec  $\hat{u}[\hat{\rho}(t)] = \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)]}{\partial \rho^T}$ , et  $\frac{\hbar^2}{2m^*} [\hat{\rho}(t)] = \frac{\partial E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)]}{\partial \tau^T}$  où  $m^*$  est la masse effective dont nous expliquerons la signification physique un peu plus loin dans la suite de l'exposé. En développant la différentielle de l'opérateur densité d'énergie cinétique, et en utilisant la propriété de tricyclicité des traces, l'équation (4.60) se réduit sous une forme plus transparente :

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} dt \delta E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \hat{u}[\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\rho}(t) + \frac{\hbar^2}{2m^*} [\hat{\rho}(t)] \hat{p} \delta \hat{\rho}(t) \hat{p} \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \hat{u}[\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\rho}(t) + \hat{p} \frac{\hbar^2}{2m^*} [\hat{\rho}(t)] \hat{p} \delta \hat{\rho}(t) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \text{Tr} \left( \hat{h}[\hat{\rho}(t)] \delta \hat{\rho}(t) \right)
\end{aligned} \tag{4.61}$$

où  $\hat{h}[\hat{\rho}(t)]$  est l'opérateur énergie à un corps, dépendant uniquement de la densité à un corps, et donné par la relation :

$$\hat{h}[\hat{\rho}(t)] = \hat{p} \frac{\hbar^2}{2m^*} [\hat{\rho}(t)] \hat{p} + \hat{u}[\hat{\rho}(t)] \quad (4.62)$$

En utilisant l'équation (4.33) on peut déterminer la différentielle de l'opérateur densité à un corps :

$$\delta\hat{\rho}(t) = \sum_{m=1}^A |\delta\psi_m(t)\rangle \langle\psi_m(t)| + |\psi_m(t)\rangle \langle\delta\psi_m(t)| \quad (4.63)$$

que l'on peut réinjecter dans la relation (4.60) où :

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} dt \delta E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{m=1}^A \sum_{n=1}^A \left[ \langle\psi_n(t)| \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\delta\psi_m(t)\rangle \langle\psi_m(t)| \psi_n(t)\rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle\psi_n(t)| \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\psi_m(t)\rangle \langle\delta\psi_m(t)| \psi_n(t)\rangle \right] \end{aligned} \quad (4.64)$$

Comme la base est orthonormée, cette expression devient :

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \delta E_{\text{HF}}[\hat{\rho}(t), \hat{\tau}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{m=1}^A \left[ \langle\psi_m(t)| \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\delta\psi_m(t)\rangle + \langle\delta\psi_m(t)| \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\psi_m(t)\rangle \right] \quad (4.65)$$

Sachant que les vecteurs  $|\delta\psi_m(t)\rangle$  et  $\langle\delta\psi_m(t)|$  sont indépendants, on peut finalement déduire à l'aide des relations (4.57), (4.59), et (4.65) les équations couplées qui donnent l'évolution des états à une particule de la base orthonormée :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_m(t)\rangle = \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\psi_m(t)\rangle \quad (4.66)$$

Nous venons donc de démontrer que l'évolution des états à une particule est gérée par l'équation Hartree-Fock dépendante du temps. Résoudre les équations de mouvement pour le modèle FMD est exactement équivalent à résoudre les équations TDHF :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_m(t)\rangle = \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\psi_m(t)\rangle \iff \dot{q}_\mu = - \sum_\nu \mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu} \quad (4.67)$$

Si les fonctions d'onde individuelles sont exprimées comme des gaussiennes paramétrées, et la base de gaussiennes est orthonormalisée à chaque pas en temps, à l'aide de l'équation (4.31). L'équivalence exprimée par l'équation (4.67) ne conduit pas encore à des schémas de résolution numérique efficaces. A ce but il est plus convenable d'exprimer TDHF dans la représentation des matrices densité. Commençons par calculer la dérivée de  $\hat{\rho}$  par rapport au temps :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i\hbar \sum_m \left[ \frac{d}{dt} |\psi_m(t)\rangle \langle\psi_m(t)| + |\psi_m(t)\rangle \frac{d}{dt} \langle\psi_m(t)| \right] \quad (4.68)$$



En insérant la relation (4.66) dans cette dernière, on trouve :

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= \sum_m \left[ \hat{h}[\hat{\rho}(t)] |\psi_m(t)\rangle \langle \psi_m(t)| - |\psi_m(t)\rangle \langle \psi_m(t)| \hat{h}[\hat{\rho}(t)] \right] \\
&= \hat{h}[\hat{\rho}(t)] \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{h}[\hat{\rho}(t)] \\
&= [\hat{h}[\hat{\rho}(t)], \hat{\rho}(t)]
\end{aligned} \tag{4.69}$$

qui n'est rien d'autre que l'équation TDHF dans la représentation des matrices densité. Nous pouvons donc établir l'équivalence suivante :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{h}[\hat{\rho}(t)], \hat{\rho}(t)] \iff \dot{q}_\mu = - \sum_\nu \mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu} \tag{4.70}$$

Cette équivalence démontre que la connaissance de l'évolution dynamique de l'opérateur densité à un corps est suffisante pour la résolution des équations FMD.

Ceci implique en particulier que le calcul de toute observable dans FMD, peut se réduire au calcul de fonctionnelles de l'opérateur densité à un corps. Si nous revenons à l'évaluation de la valeur moyenne d'un opérateur à deux corps, l'équation (4.54) peut donc se réduire à l'évaluation du champ moyen :

$$\begin{aligned}
\langle Q(t) | \hat{V} | Q(t) \rangle &= \text{Tr} (\hat{u}[\hat{\rho}] \hat{\rho}) \\
&= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle q_k | \hat{u}[\hat{\rho}] | q_l \rangle O_{lk}
\end{aligned} \tag{4.71}$$

Concrètement dans les équations d'évolution (4.14), le terme qui comportait un effort numérique d'ordre  $A^4$  devient simplement :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\mu} = \text{Tr} \left( \hat{h}[\hat{\rho}] \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \tag{4.72}$$

i.e. un effort numérique d'ordre  $A^2$ .

D'un point de vue conceptuel, l'équation (4.70) démontre que le modèle FMD est un modèle de dynamique en champ moyen. Néanmoins il existe une différence majeure entre le modèle FMD et le modèle TDHF dans sa formulation originelle. En ce qui concerne TDHF, les états à une particule du champ moyen n'ont aucune restriction et peuvent évoluer librement. Par contre si l'on revient au modèle FMD, les états à une particule sont imposés comme étant des gaussiennes. A priori, on pourrait donc voir le modèle FMD comme une régression par rapport à la théorie TDHF. Ceci est certainement vrai dans certaines situations physiques. Un des exemples est de considérer les mouvements collectifs avec le modèle AMD que nous aborderons au chapitre 5. Nous verrons que la contrainte de largeur fixe empêche pour ce cas la compression du système. Un autre exemple est l'impossibilité d'obtenir des solutions d'onde plane avec le modèle AMD. On ne peut obtenir des particules libres, et l'on doit dans ce cas, enlever à la main un degré de liberté pour le mouvement du centre de masse. Ces limitations évidentes ne sont pas présentes avec la fonction d'onde FMD que nous utiliserons. En plus l'utilisation d'une base de gaussiennes s'avère extrêmement flexible dans tous les problèmes où les particules sont fortement localisées dans l'espace, en particulier les systèmes à fortes fluctuations de densité, comme

l'écorce des étoiles à neutrons qui nous intéresse plus particulièrement, et les réactions de multifragmentation, pour lesquelles le modèle TDHF est incapable de reproduire la formation d'agrégats. On peut également ajouter que les modèles de dynamique moléculaire permettent de rajouter plus facilement des corrélations au delà du champ moyen par rapport au modèle TDHF [64, 65, 66], car ils permettent une implémentation plus aisée d'un mouvement stochastique des particules. Ce genre de travaux a déjà été réalisé dans le cadre du modèle AMD [77, 78, 79, 80, 81], et il serait envisageable dans un futur proche, de réaliser une mise en oeuvre similaire pour le modèle FMD.

## 4.4 Implémentation de l'interaction nucléaire.

A cause de la présence d'un coeur dur dans l'interaction nucléon-nucléon, dans toutes les approches de champ moyen [57] l'interaction nucléaire n'est pas une interaction nue, mais une interaction effective, c'est à dire une interaction modèle, définie de façon à produire en champ moyen des résultats aussi proches que possible à ceux que l'interaction élémentaire produirait sur une fonction d'onde exacte. Nombre de travaux théoriques essayent d'obtenir des interaction effectives avec des approches microscopiques, mais les résultats les plus réalistes à l'heure actuelle sont produits en utilisant des interactions phénoménologiques, dont les paramètres ont été contraints sur le plus grands nombre possible d'observables expérimentales. L'idée principale est d'implémenter l'une de ces interactions dans notre modèle FMD, et ceci afin de réaliser des calculs réalistes en physique nucléaire. Les deux interactions effectives les plus couramment utilisées, sont les interactions de Gogny [82, 83] et de Skyrme [84, 85]. Elles ont été appliquées dans la plus grande partie des calculs de champ moyen avec un succès incontesté. La principale caractéristique qui différencie ces deux familles d'interactions, est que l'interaction de Gogny est une interaction de portée finie, alors que l'interaction de Skyrme est une interaction de contact de portée nulle. A l'heure actuelle, leur paramétrisation fait encore l'objet d'intenses travaux qui tendent à les perfectionner surtout pour les noyaux exotiques et la matière riche en neutrons. Les modèles AMD existants utilisent l'interaction de Gogny. Pour notre implémentation en termes de matrice densité, il est important que l'interaction nucléaire choisie puisse être facilement convertie en une fonctionnelle de la densité, pour que le passage entre énergie et champ moyen soit analytique. Ceci se fait plus aisément avec des fonctionnelles de Skyrme. De plus les dernières paramétrisations de Saclay-Lyon de l'interaction de Skyrme permettent une très bonne reproduction des propriétés de la matière riche en neutrons, ce qui constitue un avantage si l'on souhaite étudier la physique des écorces de proto-étoile à neutrons. Au cours de cette sous-partie nous expliciterons la fonctionnelle de Skyrme, et nous détaillerons son implémentation au sein du modèle FMD. Nous verrons également que le fait d'utiliser la fonctionnelle de Skyrme à la place de l'interaction de Gogny dans le cadre du modèle FMD peut présenter certaines limites.

### 4.4.1 Introduction à la fonctionnelle de Skyrme.

L'interaction de Skyrme a été proposée au cours des années cinquante [84, 85]. Elle a commencé à être utilisée massivement après le succès de son utilisation dans le cadre de la théorie Hartree-Fock par Vautherin et Brink [86] pour reproduire les états fondamentaux de noyaux sphériques. Depuis environ une trentaine d'année, elle est couramment utilisée aussi bien dans le cadre du modèle statique HF, que dans sa version dépendante du temps

TDHF. La forme la plus standard du potentiel de Skyrme utilisé est la suivante :

$$\begin{aligned}
 V(\hat{\vec{r}}_1, \hat{\vec{r}}_2) = & \\
 & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\hat{\vec{r}}) \quad \text{terme centrale} \\
 + \frac{t_1}{2}(1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \left[ \hat{\vec{P}}^2 \delta(\hat{\vec{r}}) + \delta(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{P}}^2 \right] + t_2(1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \hat{\vec{P}} \delta(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{P}} & \quad \text{termes non-locaux} \\
 + \frac{t_3}{6}(1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \left[ \rho(\hat{\vec{R}}) \right]^\alpha \delta(\hat{\vec{r}}) & \quad \text{terme dépendant de la densité} \\
 + iW_0 \hat{\vec{\sigma}} \cdot \left[ \hat{\vec{P}} \times \delta(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{P}} \right] & \quad \text{terme spin-orbite} \quad (4.73)
 \end{aligned}$$

avec les notations couramment utilisées dans la littérature :

$$\begin{aligned}
 \hat{\vec{r}} &= \hat{\vec{r}}_1 - \hat{\vec{r}}_2 \quad , \quad \hat{\vec{R}} = \frac{1}{2} (\hat{\vec{r}}_1 + \hat{\vec{r}}_2) \quad , \quad \hat{\vec{P}} = \frac{1}{2} (\hat{\vec{p}}_1 - \hat{\vec{p}}_2) \\
 \hat{\vec{\sigma}} &= \hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2 \quad , \quad \hat{P}_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \hat{\vec{\sigma}}_2) \quad (4.74)
 \end{aligned}$$

où  $\hat{\vec{\sigma}}$  représente sous une forme vectorielle les trois matrices de Pauli, et les flèches indiquent la direction dans laquelle agissent les opérateurs. Le terme central ainsi que le terme dépendant de la densité représentent la portée nulle de l'interaction, et ils sont nécessaires pour reproduire les propriétés de saturation de la matière nucléaire. Les termes non locaux sont des termes dépendant des opérateurs impulsion qui simulent la portée finie de l'interaction nucléaire, et ils donnent lieu à une masse effective, différente de la masse nue. Enfin le terme spin-orbite indispensable pour reproduire les bonnes fermetures de couches des noyaux stables, génère des termes dépendants du gradient de la densité. En effet les effets liés au spin-orbite sont essentiellement localisés en surface des noyaux. Ces différents termes constituent l'interaction de Skyrme et donnent lieu à une densité d'énergie qui est une fonctionnelle des densités locales :

$$\mathcal{H}_{\text{Skyrme}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (4.75)$$

avec :

$$\mathcal{E}_{\text{Skyrme}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_3 + \mathcal{E}_{\text{Eff}} + \mathcal{E}_{\text{Fin}} + \mathcal{E}_{\text{SO}} + \mathcal{E}_{\text{SG}} \quad (4.76)$$

où  $\mathcal{E}_0$  est un terme de portée nulle,  $\mathcal{E}_3$  un terme dépendant de la densité,  $\mathcal{E}_{\text{Eff}}$  un terme dépendant de la masse effective,  $\mathcal{E}_{\text{Fin}}$  un terme contenant les effets de portée finie,  $\mathcal{E}_{\text{SO}}$  un terme de couplage spin-orbite, et  $\mathcal{E}_{\text{SG}}$  un terme de couplage dû au couplage tenseur spin-gradient :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_0 &= a_{01} \rho^2 + a_{02} (\rho_p^2 + \rho_n^2) \\
 \mathcal{E}_3 &= \rho^\alpha [a_{31} \rho^2 + a_{32} (\rho_p^2 + \rho_n^2)] \\
 \mathcal{E}_{\text{Eff}} &= a_{\text{E1}} \tau \rho + a_{\text{E2}} [\tau_p \rho_p + \tau_n \rho_n] \\
 \mathcal{E}_{\text{Fin}} &= a_{\text{F1}} \vec{\nabla}^2 \rho + a_{\text{F2}} [\vec{\nabla}^2 \rho_p + \vec{\nabla}^2 \rho_n] \\
 \mathcal{E}_{\text{SO}} &= a_{\text{SO}} [\vec{S} \cdot \vec{\nabla} \rho + \vec{S}_p \cdot \vec{\nabla} \rho_p + \vec{S}_n \cdot \vec{\nabla} \rho_n] \\
 \mathcal{E}_{\text{SG}} &= a_{\text{S1}} \vec{S}^2 + a_{\text{S2}} [\vec{S}_p^2 + \vec{S}_n^2] \quad (4.77)
 \end{aligned}$$

Pour la dérivation de la densité d'énergie HF (4.77) à partir de l'interaction de Skyrme (4.73), on peut trouver l'ensemble des étapes de calcul dans les références [86, 57]. L'ensemble des différentes constantes constituant la fonctionnelle peut être exprimé en fonction des paramètres de l'interaction :

$$\begin{aligned}
a_{01} &= \frac{t_0}{4} (2 + x_0), \quad a_{02} = -\frac{t_0}{4} (2x_0 + 1) \\
a_{31} &= \frac{t_3}{24} (2 + x_3), \quad a_{32} = -\frac{t_3}{24} (2x_3 + 1) \\
a_{E1} &= \frac{1}{8} [t_1 (2 + x_1) + t_2 (2 + x_2)] \\
a_{E2} &= \frac{1}{8} [t_2 (2x_2 + 1) - t_1 (2x_1 + 1)] \\
a_{F1} &= \frac{1}{32} [3t_1 (2 + x_1) - t_2 (2 + x_2)] \\
a_{F2} &= -\frac{1}{32} [t_2 (2x_2 + 1) + 3t_1 (2x_1 + 1)] \\
a_{SO} &= \frac{W_0}{2}, \quad a_{S1} = -\frac{1}{16} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \\
a_{S2} &= \frac{1}{16} (t_1 - t_2)
\end{aligned} \tag{4.78}$$

Les différentes densités qui interviennent dans la fonctionnelle sont la densité de particules, la densité d'énergie cinétique, et la densité de courant de spin  $\rho_q$ ,  $\tau_q$ , et  $\vec{S}_q$  ( $q=n,p$ ). Le code numérique que nous avons écrit pour résoudre les équations FMD sera construit à l'aide des quatre premiers termes de la fonctionnelle. Nous négligerons l'ensemble des termes incluant la densité de courant de spins. En effet ces termes s'annulent exactement dans la matière infinie saturée en spin, qui nous intéresse plus particulièrement. Même en ce qui concerne les noyaux finis, ces termes n'apportent que de très faibles corrections à l'énergie totale du système, et ils ont un rôle important seulement si l'on cherche à retrouver de manière quantitative les positions de niveaux d'énergie. Leur implémentation alourdirait de manière significative la numérique de notre code, et inclurait d'avantage d'instabilités numériques.

Le tableau suivant présente les différentes paramétrisations de la fonctionnelle de Skyrme que nous allons utiliser par la suite lors de nos futurs calculs.

	SIII	SGII	SLy4	SLy4d	SLy5
$t_0$ (MeV.fm <sup>3</sup> )	-1128,75	-2645	-2488,91	-2479.662	-2484,88
$t_1$ (MeV.fm <sup>5</sup> )	395	340	486,82	473.216	483,13
$t_2$ (MeV.fm <sup>5</sup> )	-95	-41,9	-546,39	-333.654	-549,40
$t_3$ (MeV.fm <sup>3+3<math>\alpha</math></sup> )	14000	15595	13777	13487	13763
$x_0$	0,45	0,09	0,834	0.8122	0,778
$x_1$	0	0	-0,344	-0.7228	-0,328
$x_2$	0	1,425	-1	-1	-1
$x_3$	1	0,060044	1,354	1.398	1,267
$\alpha$	1	1/6	1/6	1/6	1/6
$W_0$ (MeV.fm <sup>5</sup> )	120	105	123	128	126

L'interaction SIII [87] est l'une des premières interactions de Skyrme proposées dans la littérature. Elle contient très peu de paramètres qui ont été contraints, pour reproduire les énergies de liaisons des noyaux doublement magiques. Mais en ce qui concerne d'autres observables plus sophistiquées les résultats ne sont pas réalistes. C'est pourquoi d'autres améliorations ont été proposées en ajoutant des paramètres supplémentaires, et en contraignant les nouvelles interactions de Skyrme sur d'autres observables expérimentales. Les fréquences des résonances monopolaires géantes en sont un exemple. Elle fournissent une contrainte forte sur le terme dépendant de la densité, qui a son tour détermine le coefficient d'incompressibilité  $K_\infty$  de la matière nucléaire. De même la reproduction des résonances de Gamow-Teller permet de fixer la dépendance en spin. L'ensemble de ces contraintes a été pris en compte lors de la paramétrisation de l'interaction SGII [88], qui pour cette raison peut être qualifiée comme étant une interaction réaliste. Au cours des années'90, la paramétrisation de Saclay-Lyon a fait son apparition avec l'objectif d'améliorer la dépendance en isospin [93, 94, 95, 97]. Les paramètres de cette interaction ont été fixés pour reproduire l'équation d'état de la matière de neutrons, calculée par des modèles microscopiques ab-initio, et ceci afin de mieux rendre compte des propriétés des noyaux très riches en neutrons. L'ensemble de ces paramètres a été ajusté sur les observables expérimentales qui sont sensibles à ces propriétés, tels que la différence de masse entre isotopes. Il faut également remarquer que l'ensemble des paramétrisations citées précédemment, a été ajusté pour des calculs Hartree-Fock, où le mouvement du centre de masse engendre des états spurieux dont la contribution à l'énergie du système doit être éliminée. Ceci peut être réalisé en remplaçant le Hamiltonien d'énergie cinétique par :

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{\text{Cin}} &= \hat{H}_{\text{Cin}} - \frac{\left(\sum_{i=1}^A \hat{p}_i\right)^2}{2mA} \\ &= \hat{H}_{\text{Cin}} - \frac{1}{2mA} \left[ \sum_{i=1}^A \hat{p}_i^2 + \sum_{i \neq j=1}^A \hat{p}_i \cdot \hat{p}_j \right]\end{aligned}\quad (4.79)$$

Habituellement, seul le terme à un corps est pris en compte, ce qui conduit simplement à l'addition d'une correction en  $-1/A$  au terme d'énergie cinétique. Le terme à deux corps est plus difficile à mettre en oeuvre, et il n'a pas été pris en compte lors de l'ajustement des paramétrisations citées précédemment. Il est généralement omi car les corrections qu'il induit sont relativement faibles en valeur absolue. L'ensemble de ces corrections est donc nécessaire si l'on cherche à obtenir une meilleure description des noyaux dans leur référentiel intrinsèque [97, 100].

Au contraire si l'on cherche à décrire une collision entre noyaux, celle-ci est décrite par un observateur extérieur qui définit ainsi le repère du laboratoire. Il ne faut donc pas prendre en compte ces corrections dans l'ajustement de forces dédiées à ce type de calcul. C'est ce qui différencie la paramétrisation SLy4, avec correction à un corps du mouvement du centre de masse, de la paramétrisation SLy4d [101, 102], sans cette correction.

Le tableau suivant énumère l'ensemble des principales propriétés physiques de la matière nucléaire infinie, extraites à partir des différentes paramétrisations de l'interaction de Skyrme utilisées :

Les différentes quantités tabulées sont déterminées en utilisant le fait que dans la matière nucléaire infinie symétrique, la fonctionnelle d'énergie (4.76) se simplifie de la

	SIH	SGII	SLy4	SLy5
$\rho_0$ (fm <sup>-3</sup> )	0,145	0,158	0,16	0,16
$a_v$ (MeV)	-15,51	-15,794	-15,969	-15,983
$K_\infty$ (MeV)	355,4	214,6	229,9	229,9
$m^*/m$	0,76	0,79	0,7	0,7
$a_I$ (MeV)	28,16	26,83	32	32,03

TAB. 4.1 – Ensemble des principales propriétés physique de la matière nucléaire infinie, pour les différentes interactions de Skyrme utilisées.  $\rho_0$  est la densité de saturation,  $a_v$  l'énergie par particule à saturation,  $K_\infty$  le coefficient d'incompressibilité,  $m^*$  la masse effective, et  $a_I$  l'énergie de symétrie.

façon suivante [97] :

$$a_v = \frac{\mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\rho} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{2/3} + \frac{3t_0}{8} \rho + \frac{3}{80} (3t_1 + t_2(5 + 4x_2)) \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{5/3} + \frac{t_3}{16} \rho^{1+\alpha} \quad (4.80)$$

Le module d'incompressibilité est défini par la dérivée seconde au point de saturation :

$$\begin{aligned} K_\infty &= 9\rho_0^2 \left( \frac{d^2 a_v}{d\rho^2} \right)_{\rho_0} \\ &= -\frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho_0^{2/3} + \frac{3}{8} (3t_1 + t_2(5 + 4x_2)) \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho_0^{5/3} + t_3 \frac{9}{16} \alpha(\alpha + 1) \rho_0^{1+\alpha} \end{aligned} \quad (4.81)$$

Les estimations les plus fiables de  $K_\infty$  à partir des données sur les résonances géantes monopolaires donnent  $K_\infty = 210 \pm 30 \text{ MeV}$  [120]. On remarque donc que, contrairement aux interactions réalistes qui sont en très bon accord avec cette valeur, l'interaction SIH donne une surestimation de cette observable. Le coefficient d'asymétrie  $a_I$  est défini par :

$$a_I = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 a_v}{\partial I^2} \right)_{I=0} \quad (4.82)$$

où  $I = (\rho_n - \rho_p)/\rho$  est l'asymétrie d'isospin.

Nous avons maintenant présenté la fonctionnelle de Skyrme, ainsi que les différentes paramétrisations que nous allons utiliser. Des discussions plus détaillées de la fonctionnelle de Skyrme, ainsi que des différentes densités la constituant sont données dans les références [89, 90, 91, 92, 96, 98, 99]. Nous devons à présent calculer le champ moyen intervenant dans l'équation d'évolution (4.14). En pratique le calcul du champ moyen de la fonctionnelle de Skyrme est assez complexe, c'est pourquoi nous allons présenter dans la prochaine section une procédure systématique permettant son évaluation.

#### 4.4.2 Généralisation des observables à un corps quelconques.

L'implémentation de l'interaction de Skyrme dans notre modèle FMD nécessite le calcul du champ moyen, c'est à dire la dérivée  $\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}}{\partial q_\mu}$ . Ce calcul reste relativement simple à

évaluer, si l'expression de la densité d'énergie est une uniquement une fonctionnelle de la densité  $\mathcal{H}_{\text{Skyrme}} = \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}[\rho]$ . Dans ce cas le champ moyen est donné par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}[\rho]}{\partial q_\mu} &= \text{Tr} \left( \hat{u}_q[\hat{\rho}] \frac{\partial \hat{\rho}_q}{\partial q_\mu} \right) \\ &= \int u_q(\vec{r}) \frac{\partial \rho_q(\vec{r})}{\partial q_\mu} d^3\vec{r} \end{aligned} \quad (4.83)$$

avec

$$u_q(\vec{r}) = \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}(\vec{r})}{\partial \rho_q} \quad (4.84)$$

Néanmoins nous avons déjà vu que si l'on considère l'énergie cinétique, la densité d'énergie sera aussi dépendante de la densité d'énergie cinétique,  $\mathcal{H}_{\text{Skyrme}} = \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}[\rho, \tau]$ . Ceci complique les calculs du champ moyen, et d'autant plus si l'on considère aussi les densités de spin. On verra également dans la prochaine section que d'autres densités devront être ajoutées avant d'avoir la fonctionnelle définitive. C'est pourquoi nous avons élaboré un formalisme systématique [104] pour évaluer le champ moyen, à partir de la fonctionnelle la plus générale possible. Nous partons du fait que toutes observables en approximation de champ moyen peuvent être exprimées en fonction de l'opérateur densité à un corps avec :

$$\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}(\vec{r}) = \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{A} \hat{\rho} \hat{B} \right) \quad (4.85)$$

où  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont deux opérateurs à un corps caractérisant la densité considérée. La fonctionnelle la plus générale possible :

$$\mathcal{H} = \int \mathcal{E}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (4.86)$$

peut être exprimée comme une fonctionnelle d'un ensemble de densités locales  $\{\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}\}$  associées à des paires d'opérateurs  $(\hat{A}, \hat{B})$  tel que :

$$\mathcal{E}(\vec{r}) = \mathcal{E}[\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}(\vec{r})] \quad (4.87)$$

Pour illustrer notre formalisme, nous pouvons donner des exemples de densités couramment utilisées dans la littérature. Le cas le plus simple est la densité de particules pour une espèce donnée :

$$\rho_q(\vec{r}) = \rho_{(\hat{\kappa}_q, 1)}(\vec{r}) \quad (4.88)$$

où  $\hat{\kappa}_q$  est l'opérateur de projection sur les états d'isospin. Ce traitement n'est pas limité aux observables locales. Par exemple la densité d'énergie cinétique s'écrit :

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{k=1}^3 \rho_{(\hat{\kappa}_q \hat{p}_k, \hat{p}_k)}(\vec{r}) \quad (4.89)$$

La densité de courant de spin peut être décomposée comme une somme sur plusieurs densités locales, où sa  $i$ -ème composante est donnée par :

$$\vec{S}_{q,i}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{k,s=1}^3 \epsilon_{iks} \left( \rho_{(\hat{\kappa}_q \hat{p}_k, \hat{s})}(\vec{r}) + \rho_{(\hat{\kappa}_q \hat{s}, \hat{p}_k)}(\vec{r}) \right) \quad (4.90)$$

où  $\hat{\sigma}$  qui est la matrice de Pauli, et  $\epsilon_{iks}$  est le tenseur anti-symétrique de Levi-Cevita. Ce formalisme permet aussi de définir des densités plus complexes, telles que le gradient d'ordre  $n$  d'une densité  $\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}(\vec{r})$  donnée, et qui sera défini par :

$$\vec{\nabla}^n \rho_{(\hat{A}, \hat{B})}(\vec{r}) = \sum_{j=0}^n i^n (-1)^{n-j} C_n^j \rho_{(\kappa_q \hat{p}^j \hat{A}, \hat{B} \hat{p}^{n-j})}(\vec{r}) \quad (4.91)$$

où les coefficients  $C_n^j = n!/(j!(n-j)!)$  sont les coefficient binomiaux. Si l'on revient maintenant à la dérivation variationnelle de la théorie du champ moyen [57], l'opérateur champ moyen est défini par l'équation :

$$\delta\mathcal{H} = \text{Tr} \left( \hat{W} \delta\hat{\rho} \right) \quad (4.92)$$

et nous nous proposons de déterminer la forme générale de l'opérateur  $\hat{W}$ . Nous pouvons réécrire la différentielle de l'énergie totale sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{H} &= \int \delta\mathcal{E}(\vec{r}) d^3\vec{r} \\ &= \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \int \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\vec{r}) \delta\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}(\vec{r}) d^3\vec{r} \\ &= \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \int \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\vec{r}) \text{Tr} \left( \delta(\hat{r} - \vec{r}) \hat{A} \delta\hat{\rho} \hat{B} \right) d^3\vec{r} \\ &= \text{Tr} \left( \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \int \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\vec{r}) \hat{A} \delta\hat{\rho} \hat{B} \right) \end{aligned} \quad (4.93)$$

et à l'aide des équations (4.92) et (4.93), nous pouvons identifier l'expression de l'opérateur  $\hat{W}$  :

$$\begin{aligned} \hat{W} &= \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \hat{W}_{(\hat{A}, \hat{B})} \\ &= \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \hat{B} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\vec{r}) \hat{A} \end{aligned} \quad (4.94)$$

L'expression du champ moyen dans le cas général peut ainsi être obtenue très simplement en connaissant l'ensemble des opérateurs  $\hat{W}_{(\hat{A}, \hat{B})}$ , qui nécessitent à leur tour la connaissance des paires d'opérateurs  $(\hat{A}, \hat{B})$  des densités locales constituant la fonctionnelle de l'énergie. Nous mettrons en application concrète ce formalisme après avoir abordé dans la section suivante les modifications nécessaires à apporter à la fonctionnelle de Skyrme pour restaurer l'invariance Galiléenne. En effet La fonctionnelle de Skyrme que nous avons exposé n'est valide uniquement que pour les noyaux sphériques, et pour la matière nucléaire infinie. Si l'on souhaite étudier des noyaux déformés, ou l'implémenter dans le cadre d'un modèle dynamique, certaines quantités doivent être ajoutées afin de corriger cette fonctionnelle. Nous allons maintenant consacrer une partie de notre exposé à l'étude de ces corrections.



### 4.4.3 Restauration de l'invariance Galiléenne.

Une des limitations générales propre à toutes les approches de champ moyen, où la fonction d'onde globale est factorisée dans le produit de quantités de particule seule, est le fait que le mouvement du centre de masse ne se sépare pas du mouvement relatif. Ceci est vrai même en l'absence d'antisymétrisation. Prenons l'exemple d'un système constitué de deux particules, dont les états à une particule sont des gaussiennes, où nous négligerons les états liés au spin et à l'isospin par souci de simplicité. La fonction d'onde totale du système est définie par :

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | q_k(t), q_l(t) \rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_k(t))^2}{2a_k(t)} - \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_l(t))^2}{2a_l(t)} + i\vec{r}_1 \cdot \vec{p}_k(t) + i\vec{r}_2 \cdot \vec{p}_l(t) \right) \quad (4.95)$$

et le mouvement du centre de masse peut se mettre en évidence tel que :

$$\langle \vec{r}, \vec{R} | q_{\text{rel}}(t), Q_{\text{CM}}(t) \rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{\text{rel}}(t))^2}{2a_{\text{rel}}(t)} - \frac{(\vec{R} - \vec{R}_{\text{CM}}(t))^2}{2A_{\text{CM}}(t)} + i\vec{r} \cdot \vec{p}_{\text{rel}}(t) + i\vec{R} \cdot \vec{P}_{\text{CM}}(t) \right) \quad (4.96)$$

avec  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  et  $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$ , où l'on a respecté une condition sur les largeurs de gaussiennes tel que  $a_k(t) = a_l(t)$ . Dans ce cas on obtient :

$$\begin{aligned} \vec{R}_{\text{CM}}(t) &= \vec{r}_k(t) + \vec{r}_l(t) & \vec{r}_{\text{rel}}(t) &= \vec{r}_k(t) - \vec{r}_l(t) \\ \vec{P}_{\text{CM}}(t) &= \vec{p}_k(t) + \vec{p}_l(t) & \vec{p}_{\text{rel}}(t) &= \vec{p}_k(t) - \vec{p}_l(t) \\ A_{\text{CM}}(t) &= \frac{a(t)}{2} & a_{\text{rel}}(t) &= 2a(t) = 4A_{\text{CM}}(t) \end{aligned} \quad (4.97)$$

Cette factorisation n'est pas possible dans le cas général  $a_k(t) \neq a_l(t)$ . Même si les deux variances sont identiques, on voit bien qu'on ne peut pas avoir une onde plane pour le centre de masse, et une fonction localisée pour le mouvement relatif, car les deux variances sont proportionnelles. Par conséquent la formulation n'est pas invariante sous une transformation de Galilée. L'invariance Galiléenne peut par contre être restaurée si l'on modifie à ce but la forme de la fonctionnelle d'énergie. Les parties de la fonctionnelle qui vont être affectées par une transformation de Galilée sont celles comportant une densité d'énergie cinétique, ou une densité de courant de spin. Etant donné que nous avons négligé le terme de couplage spin-orbite, et le terme de couplage spin-gradient, seul le terme de masse effective nécessite d'être corrigé. Engel et al [105] ont proposé de restaurer la propriété d'invariance Galiléenne, en modifiant les quantités  $\tau_q \rho_q$  présentes dans le terme de masse effective, par la soustraction d'une nouvelle densité vectorielle  $\vec{J}$  tel que :

$$\tau_q \rho_q \longrightarrow \tau_q \rho_q - \vec{J}_q^2 \quad (4.98)$$

où le courant  $\vec{J}$  est donné par :

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \left( \rho_{(\hat{p}_k, \hat{\kappa}_q)}(\vec{r}) + \rho_{(\hat{\kappa}_q, \hat{p}_k)}(\vec{r}) \right) \quad (4.99)$$

Dans notre formalisme ceci s'écrit

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \hat{\kappa}_q \left\{ \hat{p}_k, \hat{\rho} \right\} \right) \quad (4.100)$$

avec  $\{\}$  qui désigne l'anti-commutateur des deux opérateurs. L'introduction de ce courant est nécessaire pour que la densité de matière au cours du temps vérifie l'équation de continuité, comme nous allons maintenant le démontrer. L'équation TDHF (4.69) s'écrit pour chacune des espèces de particules (q=n,p) par :

$$i \frac{d\hat{\rho}_q}{dt} = [\hat{h}_q[\hat{\rho}], \hat{\rho}_q] \quad (4.101)$$

où l'opérateur  $\hat{h}_q[\hat{\rho}]$  est donné par la relation (4.94) tel que :

$$\hat{h}_q[\hat{\rho}] = \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \hat{h}_{(\hat{A}, \hat{B})} = \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \hat{B} \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\hat{r}) \hat{A} \quad (4.102)$$

En identifiant les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  définissant les différentes densités présentes dans la fonctionnelle, il vient tout d'abord pour la densité de particules :

$$\begin{aligned} \rho_q(\vec{r}) = \rho_{(\hat{\kappa}_q, 1)}(\vec{r}) &\longrightarrow \hat{h}_{(\hat{\kappa}_q, 1)} = \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q, 1)}}(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \\ &= U_q(\hat{r}) \end{aligned} \quad (4.103)$$

où

$$\begin{aligned} U_q(\hat{r}) &= 2 \left( a_{01} \rho(\hat{r}) + a_{02} \rho_q(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \right) + (2 + \alpha) a_{31} \rho^{\alpha+1}(\hat{r}) \\ &\quad + a_{32} \left( \alpha \rho^{\alpha-1}(\hat{r}) \left( \rho_p^2(\hat{r}) + \rho_n^2(\hat{r}) \right) + 2 \rho^\alpha(\hat{r}) \rho_q(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \right) \\ &\quad + a_{E1} \tau(\hat{r}) + a_{E2} \tau_q(\hat{r}) \hat{\kappa}_q - 2a_{F1} (\vec{\nabla} \rho)^2(\hat{r}) - 2a_{F2} (\vec{\nabla} \rho_q)^2(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \end{aligned} \quad (4.104)$$

En utilisant la même méthodologie pour la densité d'énergie cinétique nous avons :

$$\begin{aligned} \tau_q(\vec{r}) = \sum_{k=1}^3 \rho_{(\hat{\kappa}_q \hat{p}_k, \hat{p}_k)}(\vec{r}) &\longrightarrow \hat{h}_{(\hat{\kappa}_q \hat{p}, \hat{p})} = \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q \hat{p}_k, \hat{p}_k)}}(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \hat{p}_k \\ &= \hat{p} \cdot A_q(\hat{r}) \hat{p} \end{aligned} \quad (4.105)$$

avec

$$A_q(\hat{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} + a_{E1} \rho(\hat{r}) + a_{E2} \rho_q(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \quad (4.106)$$

et de même pour la densité vectorielle  $\vec{J}_q = \frac{1}{2} (\vec{J}_{1q} + \vec{J}_{2q})$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \vec{J}_{1q}(\vec{r}) = \rho_{(\hat{\kappa}_q, \hat{p})}(\vec{r}) &\longrightarrow \hat{h}_{(\hat{\kappa}_q, \hat{p})} = \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q, \hat{p}_k)}}(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \\ &= -\hat{p} \cdot \left( a_{E1} \vec{J}(\hat{r}) + a_{E2} \vec{J}_q(\hat{r}) \right) \hat{\kappa}_q \end{aligned} \quad (4.107)$$

ainsi que pour le deuxième terme :

$$\begin{aligned} \vec{J}_{2q}(\vec{r}) = \rho_{(\hat{p}, \hat{\kappa}_q)}(\vec{r}) &\longrightarrow \hat{h}_{(\hat{p}, \hat{\kappa}_q)} = \sum_{k=1}^3 \hat{\kappa}_q \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q, \hat{p}_k)}}(\hat{r}) \hat{p}_k \\ &= -\hat{\kappa}_q \left( a_{E1} \vec{J}(\hat{r}) + a_{E2} \vec{J}_q(\hat{r}) \right) \cdot \hat{p} \end{aligned} \quad (4.108)$$

En sommant les relations (4.103), (4.105), (4.107) et (4.108), nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned}\hat{h}_q[\hat{\rho}] &= U_q(\hat{\vec{r}}) + \hat{\vec{p}} \cdot A_q(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}} \\ &\quad - a_{E1} \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}(\hat{\vec{r}}) + \vec{J}(\hat{\vec{r}}) \cdot \hat{\vec{p}} \right) \hat{\kappa}_q \\ &\quad - a_{E2} \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_q(\hat{\vec{r}}) + \vec{J}_q(\hat{\vec{r}}) \cdot \hat{\vec{p}} \right) \hat{\kappa}_q\end{aligned}\quad (4.109)$$

Il nous reste maintenant à calculer le commutateur de l'équation (4.101) en insérant cette dernière relation. Etant donné que la densité de particules est donnée par la partie diagonale de l'opérateur densité à un corps  $\rho_q(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle$ , il faut évaluer la quantité  $\langle \vec{r} | [\hat{h}_q[\hat{\rho}], \hat{\rho}_q] | \vec{r} \rangle = \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{h}_q[\hat{\rho}], \hat{\rho}_q] \right)$ . Le premier commutateur est simplement donné par :

$$\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [U_q(\hat{\vec{r}}), \hat{\rho}_q] \right) = 0 \quad (4.110)$$

Calculons maintenant le deuxième commutateur qui est beaucoup plus délicat à évaluer :

$$\begin{aligned}\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{\vec{p}} \cdot A_q(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q] \right) &= \frac{\hbar^2}{2m} \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{\vec{p}}^2, \hat{\rho}_q] \right) \\ &\quad + a_{E1} \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{\vec{p}} \cdot \rho(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q] \right) \\ &\quad + a_{E2} \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{\vec{p}} \cdot \rho_q(\hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q] \right)\end{aligned}\quad (4.111)$$

Sachant que l'expression de la densité vectoriel  $\vec{J}$  est donnée par la relation (4.100), et que la divergence d'un courant vectorielle  $\vec{V}$  est donnée par :

$$\text{div}(\vec{V}) = \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\vec{p}_k, \vec{V}_k] \right) \quad (4.112)$$

il vient pour la divergence de  $\vec{J}_q$  :

$$\begin{aligned}\text{div}(\vec{J}_q) &= \frac{i}{2\hbar} \sum_{k=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\vec{p}_k, \hat{\kappa}_q \{ \hat{\vec{p}}_k, \hat{\rho} \}] \right) \\ &= \frac{i}{2\hbar} \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}) [\hat{\vec{p}}^2, \hat{\rho}_q] \right)\end{aligned}\quad (4.113)$$

et on peut donc en déduire l'expression du premier terme intervenant dans l'équation (4.111). Il nous reste les deux autres termes à évaluer, où l'on peut avoir dans le cas

général :

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \hat{\vec{p}} \cdot \rho_{q'}(\hat{r}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q \right] \right) &= \langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} \cdot \rho_{q'}(\hat{r}) \hat{\vec{p}} \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q \hat{\vec{p}} \cdot \rho_{q'}(\hat{r}) \hat{\vec{p}} | \vec{r} \rangle \\
&= -\hbar^2 \int \int d^3 \vec{r}' d^3 \vec{r}'' \delta'(\vec{r} - \vec{r}') \delta'(\vec{r}' - \vec{r}'') \rho_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r}'' | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \\
&\quad + \hbar^2 \int \int d^3 \vec{r}' d^3 \vec{r}'' \delta'(\vec{r}' - \vec{r}) \delta'(\vec{r}'' - \vec{r}') \rho_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r}'' \rangle \\
&= -\hbar^2 \int d^3 \vec{r}' d^3 \delta'(\vec{r} - \vec{r}') \rho_{q'}(\vec{r}') \vec{\nabla} \langle \vec{r}' | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \\
&\quad + \hbar^2 \int d^3 \vec{r}' \delta'(\vec{r}' - \vec{r}) \rho_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r}' \rangle \overleftarrow{\nabla} \\
&= -\hbar^2 \vec{\nabla} \rho_{q'}(\vec{r}) \cdot \left( \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle + \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \overleftarrow{\nabla} \right) \\
&\quad - \hbar^2 \rho_{q'}(\vec{r}) \left( \overleftarrow{\nabla}^2 \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle + \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \overleftarrow{\nabla}^2 \right) \tag{4.114}
\end{aligned}$$

et à l'aide des relations (4.100) et (4.113), on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \hat{\vec{p}} \cdot \rho_{q'}(\hat{r}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q \right] \right) &= -2i\hbar \left( \rho_{q'} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + \vec{\nabla} \rho_{q'} \cdot \vec{J}_q \right) \\
&= -2i\hbar \vec{\nabla} \left( \rho_{q'} \vec{J}_q \right) \tag{4.115}
\end{aligned}$$

On en déduit donc l'expression de la relation (4.111) en utilisant les équations (4.113), et (4.115) :

$$\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \hat{\vec{p}} \cdot A_q(\hat{r}) \hat{\vec{p}}, \hat{\rho}_q \right] \right) = -i \frac{\hbar^2}{m} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q - 2i\hbar \vec{\nabla} \cdot \left( a_{E1} \rho \vec{J}_q + a_{E2} \rho_q \vec{J}_q \right) \tag{4.116}$$

Il nous reste enfin à calculer les deux derniers commutateurs, où la méthodologie est similaire à la précédente. Nous devons calculer dans le cas général l'expression  $\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_{q'}(\hat{r}) + \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \cdot \hat{\vec{p}} \right), \hat{\rho}_q \right] \right)$ . Il vient tout d'abord pour le premier terme :

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \right) \hat{\rho}_q, \hat{\rho}_q \right] \right) &= \langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_{q'}(\hat{r}) | \vec{r} \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \int d^3 \vec{r}' \delta'(\vec{r} - \vec{r}') \vec{J}_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \\
&\quad - \frac{\hbar}{i} \int d^3 \vec{r}' \delta'(\vec{r}' - \vec{r}) \vec{J}_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r}' \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{q'} \rho_q(\vec{r}) + \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \cdot \vec{J}_{q'}(\vec{r}) + \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \cdot \overleftarrow{\nabla} \cdot \vec{J}_{q'}(\vec{r}) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_q \vec{J}_{q'} \right) (\vec{r}) \tag{4.117}
\end{aligned}$$

et pour le second terme tel que :

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \left( \vec{J}_{q'} \cdot \hat{p}(\hat{r}) \right) \hat{\kappa}_{q'}, \hat{\rho}_q \right] \right) &= \langle \vec{r} | \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \cdot \hat{p} \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \cdot \hat{p} | \vec{r} \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \int d^3 \vec{r}' \delta'(\vec{r} - \vec{r}') \vec{J}_{q'}(\vec{r}) \langle \vec{r}' | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \\
&\quad - \frac{\hbar}{i} \int d^3 \vec{r}' \delta'(\vec{r}' - \vec{r}) \vec{J}_{q'}(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{q'} \rho_q(\vec{r}) + \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \vec{J}_{q'}(\vec{r}) + \langle \vec{r} | \hat{\rho}_q | \vec{r} \rangle \overleftarrow{\nabla} \cdot \vec{J}_{q'}(\vec{r}) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_q \vec{J}_{q'} \right) \tag{4.118}
\end{aligned}$$

et on en déduit à l'aide des deux relations précédentes que :

$$\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ \left( \hat{p} \cdot \vec{J}_{q'}(\hat{r}) + \vec{J}_{q'}(\hat{r}) \cdot \hat{p} \right) \hat{\kappa}_{q'}, \hat{\rho}_q \right] \right) = -2i\hbar \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_q \vec{J}_{q'} \right) \tag{4.119}$$

se qui nous permet d'avoir l'expression des deux commutateurs restants où :

$$\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ a_{E1} \left( \hat{p} \cdot \vec{J}(\hat{r}) + \vec{J}(\hat{r}) \cdot \hat{p} \right) \hat{\kappa}_q, \hat{\rho}_q \right] \right) = -2ia_{E1} \hbar \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_q \vec{J} \right) \tag{4.120}$$

et

$$\text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \hat{r}) \left[ a_{E2} \left( \hat{p} \cdot \vec{J}_q(\hat{r}) + \vec{J}_q(\hat{r}) \cdot \hat{p} \right) \hat{\kappa}_q, \hat{\rho}_q \right] \right) = -2ia_{E2} \hbar \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_q \vec{J}_q \right) \tag{4.121}$$

En utilisant les relations (4.101), (4.110), (4.116), (4.120), et (4.121) la partie diagonale de l'équation TDHF dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  pour chaque espèce de particules est donnée par :

$$i\hbar \frac{d\rho_q}{dt} = 2ia_{E1} \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{J}\rho_q - \vec{J}_q\rho \right) - i\frac{\hbar^2}{m} \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{J}_q \right) \tag{4.122}$$

et il vient finalement pour la densité totale :

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{\hbar}{m} \text{div} \left( \vec{J} \right) = 0 \tag{4.123}$$

Cette équation est une équation de conservation de charge pour la densité de particules. Ce résultat implique que l'invariance Galiléenne a été restaurée grâce à l'ajout de la densité vectorielle  $\vec{J}$ . Si l'on souhaite par la suite tenir compte des termes de spin-orbite, et de spin-gradient, d'autres courants devront être introduits dans la définition de la fonctionnelle afin de respecter les équations de continuité pour les densités de spin.

Nous avons à présent une fonctionnelle de Skyrme complète pour le modèle FMD. Nous allons maintenant procéder au calcul explicite des équations d'évolution des paramètres dynamiques (4.14).

#### 4.4.4 Dérivation systématique du champ moyen.

La méthodologie présente introduite au paragraphe (4.4.2) va nous permettre de dériver facilement la fonctionnelle de Skyrme. En utilisant les relations (4.92) et (4.94), on en

déduit que pour une espèce de particules donnée, la dérivation du champ moyen peut s'écrire comme la trace d'une somme d'opérateurs :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}}{\partial q_\mu} &= \sum_{(\hat{A}, \hat{B})} \text{Tr} \left( \hat{B} \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Skyrme}}}{\partial \rho_{(\hat{A}, \hat{B})}}(\hat{r}) \hat{A} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \\ &= \text{Tr} \left( \hat{h}_q[\hat{\rho}] \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right)\end{aligned}\quad (4.124)$$

En utilisant l'opérateur du champ moyen  $\hat{h}_q[\hat{\rho}]$  ainsi que la propriété de tricyclité des traces, nous obtenons :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}}{\partial q_\mu} &= \text{Tr} \left( \hat{\vec{p}} \cdot A_q(\hat{r}) \hat{\vec{p}} \hat{\kappa}_q \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) + \text{Tr} \left( U_q(\hat{r}) \hat{\kappa}_q \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \\ &\quad - a_{\text{E1}} \text{Tr} \left( \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}(\hat{r}) + \vec{J}(\hat{r}) \cdot \hat{\vec{p}} \right) \hat{\kappa}_q \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \\ &\quad - a_{\text{E2}} \text{Tr} \left( \left( \hat{\vec{p}} \cdot \vec{J}_q(\hat{r}) + \vec{J}_q(\hat{r}) \cdot \hat{\vec{p}} \right) \hat{\kappa}_q \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \\ &= \text{Tr} \left( A_q(\hat{r}) \hat{\vec{p}} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \hat{\vec{p}} \hat{\kappa}_q \right) + \text{Tr} \left( U_q(\hat{r}) \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \hat{\kappa}_q \right) \\ &\quad - a_{\text{E1}} \text{Tr} \left( \vec{J} \cdot \left\{ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu}, \hat{\vec{p}} \hat{\kappa}_q \right\} \right) - a_{\text{E2}} \text{Tr} \left( \vec{J}_q \cdot \left\{ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu}, \hat{\vec{p}} \hat{\kappa}_q \right\} \right)\end{aligned}\quad (4.125)$$

et en utilisant les définitions des différentes densités présentes dans la fonctionnelle, la trace se réduit à :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}}{\partial q_\mu} &= \int d^3 \vec{r} \left( A_q(\vec{r}) \frac{\partial \tau_q(\vec{r})}{\partial q_\mu} + U_q(\vec{r}) \frac{\partial \rho_q(\vec{r})}{\partial q_\mu} \right) \\ &\quad - 2 \int d^3 \vec{r} \left( a_{\text{E1}} \vec{J}(\vec{r}) + a_{\text{E2}} \vec{J}_q(\vec{r}) \right) \cdot \frac{\partial \vec{J}(\vec{r})_q}{\partial q_\mu}\end{aligned}\quad (4.126)$$

Nous avons ainsi toutes les relations qui nous permettent l'implémentation de l'interaction de Skyrme au sein du modèle FMD. L'ensemble des expressions des différentes densités, ainsi que de leur dérivées dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  sont données en annexe (A.9). La fonctionnelle de Skyrme ainsi que ses dérivées devront être estimées à chaque pas en temps. Pour calculer ces différentes intégrales, l'espace des positions à trois dimensions sera discrétisé à l'aide d'un réseau, et l'on devra tabuler sur chacun des noeuds de ce réseau les différentes densités. Dans la plupart de nos calculs, nous prendrons un réseau ayant un pas de 1fm, et nous utiliserons des boîtes de longueur  $L = 16$  fm soit un volume de  $V = 4096 \text{ fm}^3$ . Le temps de calcul associé à notre modèle est une fonction qui croît comme le carrée du nombre de particules multiplié par le volume du réseau :

$$t_{\text{Skyrme}} \propto (N^2 + Z^2) V \quad (4.127)$$

où  $N$  et  $Z$  représentent le nombre de neutrons et de protons respectivement. Dans le cas des modèles AMD et FMD publiés dans la littérature [21, 70] qui n'utilisent pas le formalisme de la fonctionnelle de la densité, et évaluent donc l'énergie moyenne  $\mathcal{H}$  à l'aide

de l'opérateur densité à deux corps, la croissance du temps de calcul est proportionnelle au nombre de particules à la puissance quatre :

$$t_{\text{Gogny}} \propto (N^4 + Z^4) \quad (4.128)$$

Cela implique que la formulation du modèle FMD à l'aide de la fonctionnelle de la densité est très avantageuse, si l'on souhaite faire des calculs pour des très grands systèmes. Nous estimons que cette approche commence à devenir plus avantageuse pour des systèmes ayant pour au moins l'une des deux espèces, un nombre de particules supérieur à environ soixante. Nous allons voir que le fait de tabuler la densité de particule pour l'interaction nucléaire peut être également très utile pour le calcul de l'interaction Coulombienne. L'implémentation de cette dernière fera l'objet de notre prochaine sous-partie.

## 4.5 Implémentation de l'interaction Coulombienne.

Nous allons maintenant nous intéresser à l'implémentation de l'interaction Coulombienne. Un calcul naïf de l'interaction Coulombienne à l'aide de l'équation (4.54), nécessiterait l'usage de l'opérateur densité à deux corps. Cela impliquerait que le temps de calcul de notre modèle augmenterait comme le nombre de particules à la puissance quatre, ce que nous cherchons à tout prix à éviter. Il va donc falloir trouver de nouveau une solution plus astucieuse pour calculer l'interaction Coulombienne qui n'utilise que l'opérateur densité à un corps, afin de conserver notre complexité en  $A^2$ . Nous séparerons par la suite l'énergie d'interaction Coulombienne en un terme direct et un terme d'échange où :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Coul}} &= \mathcal{H}_{\text{Coul-Direct}} + \mathcal{H}_{\text{Coul-Echange}} \\ &= \int d^3\vec{r} (\mathcal{E}_{\text{Coul-Direct}}(\vec{r}) + \mathcal{E}_{\text{Coul-Echange}}(\vec{r})) \end{aligned} \quad (4.129)$$

et nous proposerons pour chacun de ces termes une méthode permettant de les calculer.

### 4.5.1 Calcul du terme direct.

L'opérateur densité à un corps étant estimé dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  pour le calcul de l'interaction nucléaire, il est aisé de l'utiliser afin de calculer le terme direct de l'énergie Coulombienne d'interaction :

$$\mathcal{H}_{\text{Coul-Direct}} = \int d^3\vec{r} \rho_c(\vec{r}) V_{\text{Coul}}(\vec{r}) \quad (4.130)$$

où  $\rho_c$  est la densité de charge et  $V_{\text{Coul}}$  le potentiel Coulombien défini par :

$$V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = \frac{\alpha\hbar c}{2} \int d^3\vec{r}' \frac{\rho_c(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.131)$$

Néanmoins cette estimation de l'énergie Coulombienne n'est pas numériquement efficace, car elle comporte un temps de calcul croissant comme le pas du réseau à la puissance six, ce qui élimine entièrement l'avantage numérique de la formulation en terme de fonctionnelle de la densité. Il est possible de contourner cette difficulté en utilisant l'équation de Poisson. Cette équation donne le potentiel d'interaction Coulombienne, à l'aide de la densité de charge tel que :

$$\Delta V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = -4\pi\alpha\hbar c\rho_c(\vec{r}) \quad (4.132)$$

et qui correspond à un temps de calcul seulement proportionnel au volume du réseau, ce qui est numériquement plus avantageux que la première méthode proposée. La résolution numérique de l'équation de Poisson peut s'obtenir à l'aide d'une méthode de différences finies [110]. Cette résolution nécessite la connaissance des conditions à la limite du problème à étudier. Elle sera différente pour des systèmes finies, tels que les noyaux, ou de systèmes infinis tels que la matière d'étoile. Nous reviendrons plus tard sur les détails de sa résolution dans chacun des chapitres concernant ces deux types de systèmes.

### 4.5.2 Calcul du terme d'échange.

Le terme d'échange est beaucoup plus simple à mettre en oeuvre que le terme direct. En effet il peut être calculé très facilement à l'aide de l'approximation de Slater [106], qui est intensément utilisée dans la plupart des calculs Hartree-Fock usuels [107, 108]. Cette dernière donne le terme d'échange de l'énergie d'interaction Coulombienne comme une fonctionnelle de la densité de charge :

$$\mathcal{H}_{\text{Coul-Echange}} = -\alpha\hbar c \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int d^3\vec{r} \rho_c^{4/3}(\vec{r}) \quad (4.133)$$

La densité d'énergie Coulombienne définie par les relations (4.130) et (4.133), peut être simplement ajoutée à la fonctionnelle Hartree-Fock que nous avons défini par l'équation (4.76).

### 4.5.3 Effet de l'interaction Coulombienne sur les équations de mouvement.

Le champ moyen associé à l'interaction Coulombienne peut être aisément calculé. Dans le cas de l'énergie Coulombienne seule la densité de particules intervient dans la fonctionnelle. Il vient donc dans un premier temps :

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Coul}}}{\partial q_\mu} = \text{Tr} \left( \hat{h}_C[\hat{\rho}] \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial q_\mu} \right) \quad (4.134)$$

où  $\hat{h}_C[\hat{\rho}]$  est donnée par :

$$\begin{aligned} \hat{h}_C[\hat{\rho}] &= \hat{\kappa}_C \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Coul-Direct}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q, 1)}} + \hat{\kappa}_C \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{Coul-Echange}}}{\partial \rho_{(\hat{\kappa}_q, 1)}} \\ &= \hat{\kappa}_C \left( V_{\text{Coul}}(\hat{\vec{r}}) - \alpha\hbar c \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho_c^{1/3}(\hat{\vec{r}}) \right) \end{aligned} \quad (4.135)$$

et  $\hat{\kappa}_C$  est le projecteur sur les états de particules chargées. En calculant la trace, l'équation (4.134) se réduit simplement à l'intégrale suivante :

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Coul}}}{\partial q_\mu} = \int d^3\vec{r} \left( V_{\text{Coul}}(\vec{r}) - \alpha\hbar c \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho_c^{1/3}(\vec{r}) \right) \frac{\partial \rho_c(\vec{r})}{\partial q_\mu} \quad (4.136)$$

Nous avons ainsi tous les ingrédients qui nous permettent d'implémenter l'énergie d'interaction Coulombienne pour un système de fermions. L'ajout de l'interaction Coulombienne ne change pas significativement le temps de calcul, qui respecte toujours la relation (4.127).



Nous allons maintenant procéder à la réalisation numérique du modèle FMD. Nous exposerons les différentes méthodes numériques utilisées aussi bien pour le modèle dynamique, que pour le modèle statique.

## 4.6 Réalisation numérique.

L'équation (4.14) étant soluble analytiquement seulement pour des cas bien particuliers, on a souvent recours à des méthodes numériques afin d'en extraire des solutions. Le but de cette partie est d'illustrer deux méthodes de résolution numérique. L'une pour le modèle dynamique, et l'autre pour le modèle statique employé pour obtenir l'état fondamental des noyaux. Nous les testerons à l'aide de différents cas modèle qui admettent des solutions analytiques. Nous verrons qu'ils existent également certains critères permettant de valider la résolution numérique des équations.

### 4.6.1 Le modèle dynamique.

#### Méthode d'intégration.

La connaissance de l'évolution dynamique des différents paramètres  $q_\mu$  du modèle FMD, nécessite la résolution numérique d'un système d'équations différentielles non linéairement couplées, et qui est caractérisé par l'équation (4.14). Il faudra donc choisir une méthode d'intégration qui donne une solution du problème avec une excellente précision, une très bonne stabilité, et qui soit à la fois simple à implémenter tout en étant peu coûteuse numériquement. Nous allons d'abord introduire la méthodologie numérique que nous avons choisi pour solutionner notre problème. D'une manière générale lorsque l'on veut résoudre un système de  $N$  équations différentielles couplées, on peut le poser tel que :

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= f_1(y_1, y_2, \dots, y_N, t) \\ \frac{dy_2}{dt} &= f_2(y_1, y_2, \dots, y_N, t) \\ &\vdots \\ \frac{dy_N}{dt} &= f_N(y_1, y_2, \dots, y_N, t) \end{aligned} \quad (4.137)$$

où les  $y_i$  sont les  $N$  variables dynamiques que l'on cherche à connaître au cours du temps, et les  $f_i$  sont les  $N$  équations qui couplent l'évolution dynamique de ces dernières. On peut regrouper cet ensemble sous forme vectorielle tel que :

$$\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N) \quad \text{et} \quad \vec{f} = (f_1, f_2, \dots, f_N) \quad (4.138)$$

où le système d'équations différentielles se réduit sous une forme plus compacte par :

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}(\vec{y}, t) \quad (4.139)$$

Lorsque l'on cherche une solution numérique à ce problème, il faut définir un pas discret  $\Delta t$  d'intégration en temps, et partir d'une condition initiale au temps  $t_0$ . Pour chaque instant  $t^{(n)}$  défini par :

$$t^{(n)} = t^{(n-1)} + \Delta t \longrightarrow t^{(n)} = t^{(0)} + n\Delta t \quad (4.140)$$

on détermine pas à pas la solution du vecteur  $\vec{y}(t^{(n)}) = \vec{y}^{(n)}$ , à l'aide des solutions antérieures. De nombreuses méthodes ont été développées au cours du temps, et ceci avec des niveaux d'approximations différentes. La méthode d'ordre quatre de Runge et Kutta [109, 110] est couramment utilisée. Son succès s'explique par sa simplicité de mise en oeuvre, sa très bonne stabilité dans la plupart des problèmes, et une très bonne convergence des solutions numériques. Le schéma d'intégration est le suivant :

$$\vec{y}^{(n+1)} = \vec{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{6} \left( \vec{k}_1^{(n)} + 2\vec{k}_2^{(n)} + 2\vec{k}_3^{(n)} + \vec{k}_4^{(n)} \right) + O(\Delta t^5) \quad (4.141)$$

où les différents vecteurs  $\vec{k}_i$  sont définis par :

$$\begin{aligned} \vec{k}_1^{(n)} &= \vec{f}^{(n)} \\ \vec{k}_2^{(n)} &= \vec{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \vec{f} \left( \vec{k}_1^{(n)}, t^{(n)} \right) \\ \vec{k}_3^{(n)} &= \vec{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \vec{f} \left( \vec{k}_2^{(n)}, t^{(n+1/2)} \right) \\ \vec{k}_4^{(n)} &= \vec{y}^{(n)} + \Delta t \vec{f} \left( \vec{k}_3^{(n)}, t^{(n+1/2)} \right) \end{aligned} \quad (4.142)$$

On peut remarquer que le schéma d'intégration nécessite quatre évaluations du vecteur  $\vec{f}$ , et ceci à chaque pas en temps. Dans le cas où l'estimation du vecteur  $\vec{f}$  s'avère très lourde numériquement, la méthode de Runge et Kutta devient donc peu efficace. Une méthode permettant de solutionner ce problème est donné par les schéma d'intégrations de Adams [109, 110]. Le schéma ouvert d'ordre quatre donne la même précision que le schéma de Runge et Kutta du même ordre. Il ne nécessite cependant qu'une seule estimation du vecteur  $\vec{f}$  pour un instant  $t^{(n)}$  donné, ainsi qu'une connaissance de ce même vecteur à des instants antérieurs tel que :

$$\vec{y}^{(n+1)} = \vec{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{24} \left( 55\vec{f}^{(n)} - 59\vec{f}^{(n-1)} + 37\vec{f}^{(n-2)} - 9\vec{f}^{(n-3)} \right) + O(\Delta t^5) \quad (4.143)$$

Néanmoins ce schéma d'intégration ne permet pas d'initier le processus d'intégration pour les trois premières itérations car l'on ne peut pas connaître  $\vec{f}^{(-3)}$ ,  $\vec{f}^{(-2)}$ , et  $\vec{f}^{(-1)}$ . Pour démarrer, il faut donc utiliser le schéma de Runge et Kutta afin de tabuler les premières valeurs de  $\vec{f}$ .

La méthode proposée peut également être étendue en utilisant le schéma fermé du même ordre. Le principe est de réinjecter dans un premier temps la solution trouvée à l'aide du schéma ouvert dans ce dernier, et ensuite d'en estimer par itérations successives une meilleure valeur de  $\vec{y}^{(n+1)}$  jusqu'à convergence. Pour la  $r$ -ème itération, le schéma de Adams fermé à l'ordre quatre est donnée par :

$$\vec{y}_{(r)}^{(n+1)} = \vec{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{24} \left( 9\vec{f}_{(r)}^{(n+1)} + 19\vec{f}^{(n)} - 5\vec{f}^{(n-1)} + \vec{f}^{(n-2)} \right) + O(\Delta t^5) \quad (4.144)$$

où

$$\vec{f}_{(r)}^{(n+1)} = \vec{f} \left( \vec{y}_{(r-1)}^{(n+1)}, t^{(n+1)} \right) \quad (4.145)$$

La formule fermée, étant itérative, consomme beaucoup plus de temps de calcul que la formule ouverte, puisqu'il faut calculer  $\vec{f}$  à plusieurs reprises. Néanmoins elle est beaucoup plus stable, plus précise, et rapidement plus convergente que le schéma ouvert. Dans notre

réalisation du modèle FMD, nous combinons les deux méthodes en se limitant à un nombre maximum de deux itérations en ce qui concerne le schéma fermé. Le fait de combiner les schémas ouvert et fermé de Adams constitue ce que l'on appelle une méthode de prédicteur-corrécteur, qui allie les avantages d'une méthode fermée, en supprimant les inconvénients du temps de calcul, grâce à une première estimation à l'aide de la méthode ouverte. Nous allons maintenant appliquer le principe de cette méthode à la résolution numérique de l'équation (4.14), et nous l'appliquerons à des cas modèle, afin de valider l'algorithme de notre modèle FMD.

### Tests du modèle avec des particules libres.

Le premier cas modèle qui peut être étudié est le cas simple de fermions libres sans interaction. Le Hamiltonien du système se réduit uniquement à considérer le Hamiltonien d'énergie cinétique (4.51). Le système admet une solution analytique exacte qui peut être vérifiée numériquement. Chacune des particules aura des équations de mouvement données par des équations différentielles indépendantes :

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{r}_k}{dt} &= \frac{\vec{p}_k}{m} \\ \frac{d\vec{p}_k}{dt} &= 0 \\ \frac{d\phi_k}{dt} &= 0 \\ \frac{d\chi_k}{dt} &= 0\end{aligned}\tag{4.146}$$

ce qui constitue des équations de mouvement classiques pour chacune des gaussiennes. En termes des paramètres  $a_k$  et  $\vec{b}_k$  définis par les équations (4.19) et (4.20), nous obtenons le systèmes d'équation suivant :

$$\begin{aligned}\frac{da_k}{dt} &= i\frac{\hbar}{m} \\ \frac{d\vec{b}_k}{dt} &= 0 \\ \frac{d\phi_k}{dt} &= 0 \\ \frac{d\chi_k}{dt} &= 0\end{aligned}\tag{4.147}$$

et qui admet comme solution analytique, les relations :

$$\begin{aligned}a_k(t) &= i\frac{\hbar}{m}t + a_k(0) \\ \vec{b}_k(t) &= \vec{b}_k(0) \\ \phi_k(t) &= \phi_k(0) \\ \chi_k(t) &= \chi_k(0)\end{aligned}\tag{4.148}$$

Les fermions libres et sans interaction admettent une trajectoire rectiligne et uniforme, qui se traduit par des paramètres de gaussiennes qui restent constants au cours du temps. Seules les parties imaginaires des largeurs des gaussiennes croissent linéairement au cours

du temps, c'est à dire que les paquets d'onde gaussiens tendent à s'étaler indéfiniment au cours du temps, et à se délocaliser sous la forme d'onde plane.

Le test qui va permettre de valider notre algorithme, va consister à vérifier le système d'équations (4.14), c'est à dire à comparer la solution numérique avec la solution analytique (4.148). Notre calcul consiste à initialiser aléatoirement l'ensemble des paramètres pour un nombre donné de paquets d'onde gaussiens, et d'appliquer l'algorithme de prédicteur-correcteur afin d'obtenir une solution numérique des équations de mouvement. Le premier critère qui donne une indication sur la fiabilité de notre algorithme, est la conservation de l'énergie totale du système. La qualité de cette conservation est illustré sur la figure (4.1), et montre qu'elle est parfaitement conservée pour ce cas modèle. La conservation n'est pas

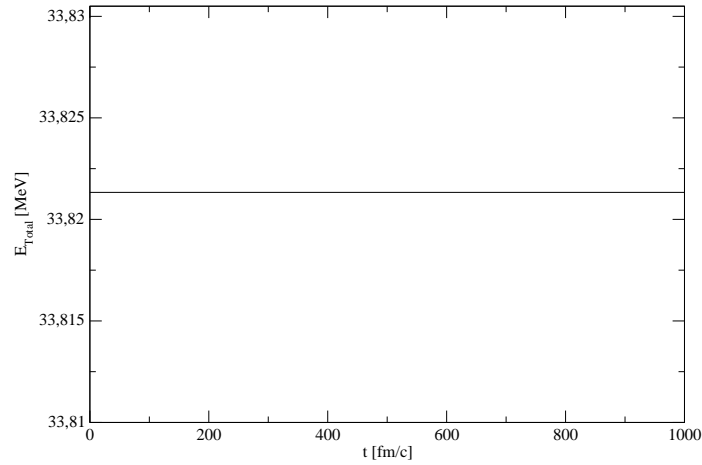


FIG. 4.1 – Evolution temporelle de l'énergie totale d'un système de quatre fermions libres.

exacte pour d'autres cas, à cause de la propagation des erreurs numériques. Toutefois dans tous nos calculs, la variation de l'énergie totale du système n'est pas supérieure à 0.1% de celle de l'instant initial pour un laps de temps de 1000 fm/c.

Si l'on regarde maintenant l'évolution des paramètres d'une des gaussiennes du système, on remarque que la solution numérique respecte très précisément la solution analytique. En ce qui concerne la partie imaginaire de la largeur de la gaussienne représenté sur la figure (4.2), son équation d'évolution est parfaitement vérifiée, et l'on peut remarquer que l'erreur absolue commise par rapport à la solution analytique  $\Delta a_I = |a_{I\text{analytique}} - a_{I\text{numerique}}|$  est inférieur à  $10^{-10}$  pour un pas en temps fixé à  $\Delta t = 0.05 \text{ fm}/c$ , tel que  $\Delta a_I < \Delta t^5$ . L'ensembles des figures (4.3) et (4.4) montre clairement, que tous les autres paramètres restent constants au cours du temps, aussi bien pour la partie réelle de la largeur de la gaussienne, le vecteur complexe  $\vec{b}_k$ , et les deux phases liées au spin  $\phi_k$  et  $\chi_k$ . Nous allons maintenant étendre nos tests à un autre cas modèle, qui est celui d'un système de particules sans interaction plongées dans un potentiel externe harmonique.

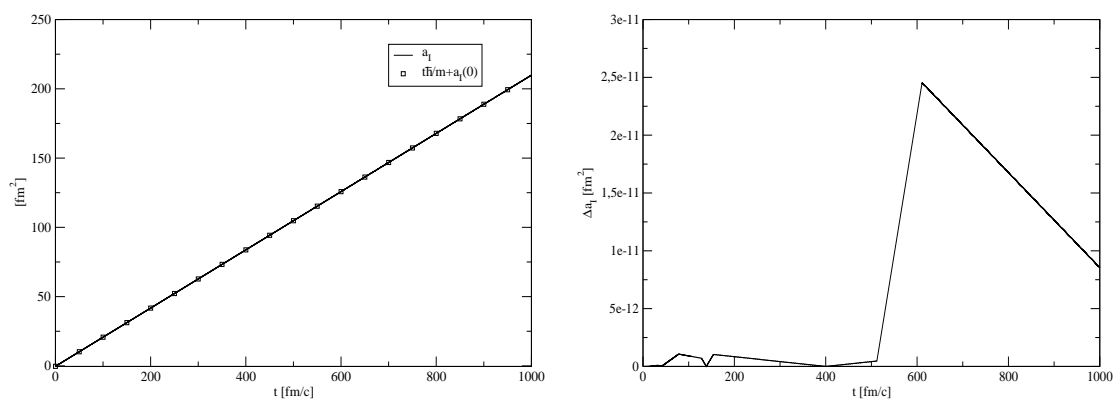


FIG. 4.2 – Représentation de l'évolution temporelle de la largeur imaginaire de la gaussienne, en trait plein pour la solution numérique, et en carrés pour la solution analytique (à gauche), ainsi que de l'erreur absolue commise (à droite) pour une particule donnée d'un système de 4 fermions libres.

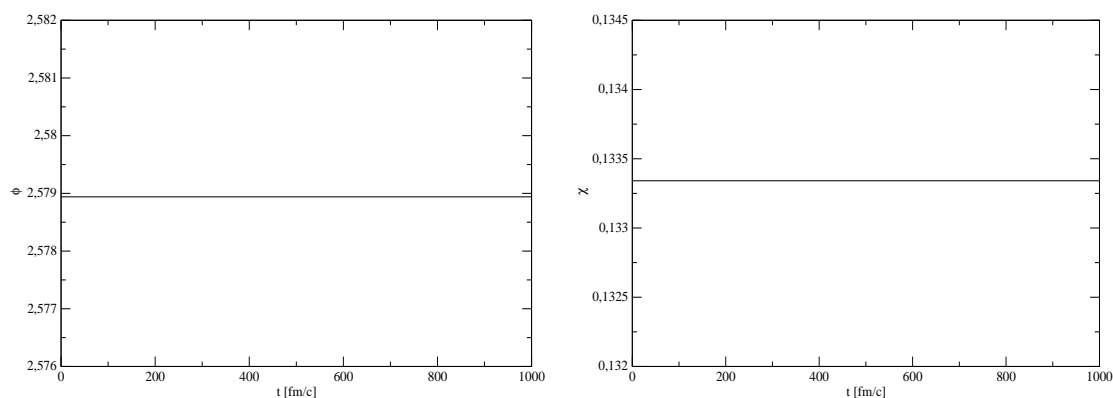


FIG. 4.3 – Evolution temporelle des phases du spin pour une particule donnée d'un système de 4 fermions libres.

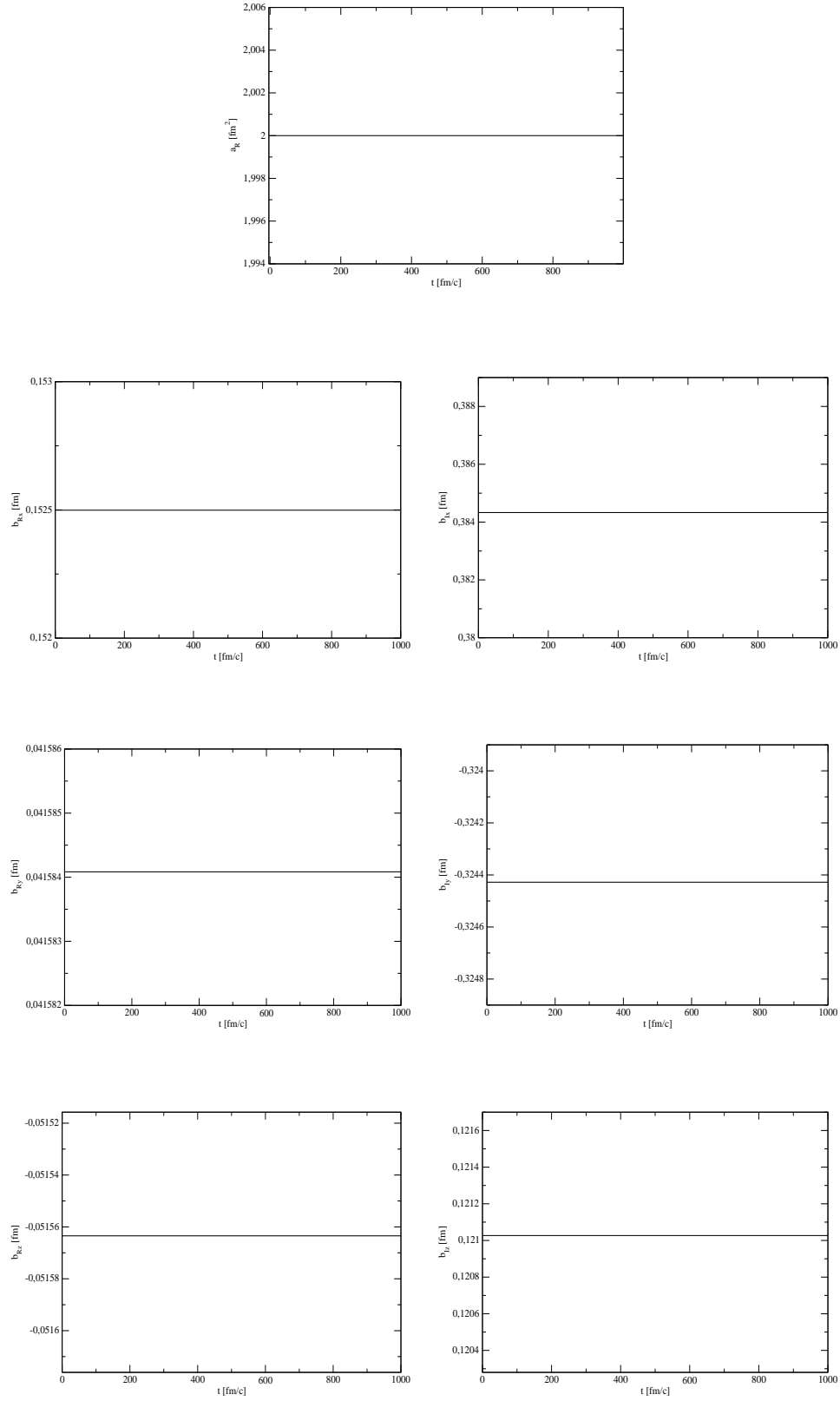


FIG. 4.4 – Evolution temporelle des différentes composantes du vecteur complexe  $\vec{b}$  pour une particule donnée d'un système de 4 fermions libres, ainsi que de la partie réelle de la largeur de la gaussienne.

**Tests du modèle avec un potentiel externe harmonique.**

Un autre cas modèle qui admet des solutions analytiques, est celui de l'oscillateur harmonique donnée par le Hamiltonien suivant :

$$\hat{H}_{\text{HO}} = \hat{H}_{\text{Cin}} + \hat{H}_{\text{Pot}} \quad (4.149)$$

où le Hamiltonien d'énergie potentielle est donné par :

$$\hat{H}_{\text{Pot}} = \sum_{i=1}^A \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{r}_i^2 \quad (4.150)$$

avec  $\omega$  la pulsation de l'oscillateur. Etant donné que nous sommes uniquement en présence d'opérateurs à un corps indépendants de la densité, les expressions de la valeur moyenne du Hamiltonien d'énergie potentielle, ainsi que de ses dérivées, admettent les mêmes formes que celles de la partie cinétique du système :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Pot}} &= \frac{1}{2} m \omega^2 \text{Tr} \left( \hat{r}^2 \hat{\rho} \right) \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle O_{lk} \end{aligned} \quad (4.151)$$

et

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{Pot}}}{\partial q_\mu} = m \omega^2 \sum_{k=1}^A \text{Re} \left[ O_{km} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| \hat{r}^2 \middle| q_k \right\rangle - \sum_{l=1}^A \langle q_l | \hat{r}^2 | q_k \rangle \sum_{n=1}^A O_{kn} \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_n \right\rangle O_{nl} \right] \quad (4.152)$$

où l'ensemble des éléments de matrices est donné en annexe (A.6). Les équations de mouvement pour chacune des particules sont données par :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_k}{dt} &= \frac{\vec{p}_k}{m} \\ \frac{d\vec{p}_k}{dt} &= -m \omega^2 \vec{r}_k \\ \frac{d\phi_k}{dt} &= 0 \\ \frac{d\chi_k}{dt} &= 0 \end{aligned} \quad (4.153)$$

et peuvent être réécrites en termes d'équations d'évolution pour les paramètres  $a_k$  et  $\vec{b}_k$  :

$$\begin{aligned} \frac{da_k}{dt} &= -i \frac{m \omega^2}{\hbar} a_k^2 + i \frac{\hbar}{m} \\ \frac{d\vec{b}_k}{dt} &= -i \frac{m \omega^2}{\hbar} a_k \vec{b}_k \end{aligned} \quad (4.154)$$

Seul le système d'équations différentielles (4.153) admet une solution analytique, et dans le cas où l'on considère pour condition initiale que les impulsions  $\vec{p}_k$  des particules sont

nuls, nous obtenons la solution bien connue :

$$\begin{aligned}
 \vec{r}_k(t) &= \vec{r}_k(0) \cos(\omega t) \\
 \vec{p}_k(t) &= -m\omega \vec{r}_k(0) \sin(\omega t) \\
 \phi_k(t) &= \phi_k(0) \\
 \chi_k(t) &= \chi_k(0)
 \end{aligned} \tag{4.155}$$

Comme pour le cas des particules libres, nous pouvons vérifier à l'aide de la figure (4.5) que la conservation de l'énergie est très bien respectée, et qu'il y a un échange énergétique entre l'énergie cinétique et potentielle à la pulsation  $2\omega$ . Ce qui est déjà un très bon indicateur en ce qui concerne la résolution de nos équations de mouvements. Les figures

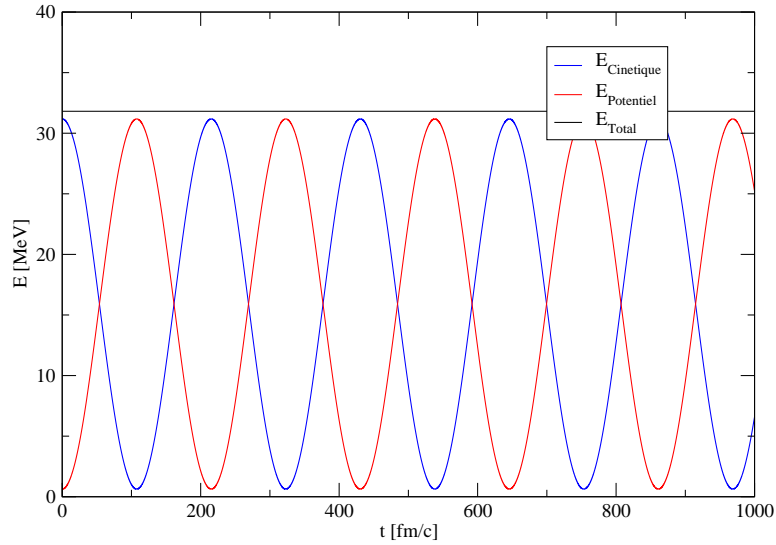


FIG. 4.5 – Evolution de l'énergie cinétique, potentielle et totale, d'un système de 4 nucléons plongés dans un puit harmonique, et sans interaction avec  $\frac{1}{2}m\omega^2 = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ .

(4.6) montrent que la résolution numérique de (4.14) respecte bien les relations données par le jeu d'équations différentielles (4.154). Néanmoins il ne s'agit que d'un test, qui ne donne aucune information sur la qualité de la méthode d'intégration. Les figures (4.7) montrent que les phases associées au spin restent constantes au cours du temps. Le test le plus probant consiste à comparer la solution analytique et numérique pour l'évolution dynamique des positions et des impulsions. Les figures (4.8) et (4.9) montrent clairement qu'il y a un très bon accord entre la solution numérique et la solution analytique, et que les erreurs relatives pour chacune des observables respectent une méthode d'intégration d'ordre quatre, c'est à dire sont toujours inférieurs à  $\Delta t^5$ .



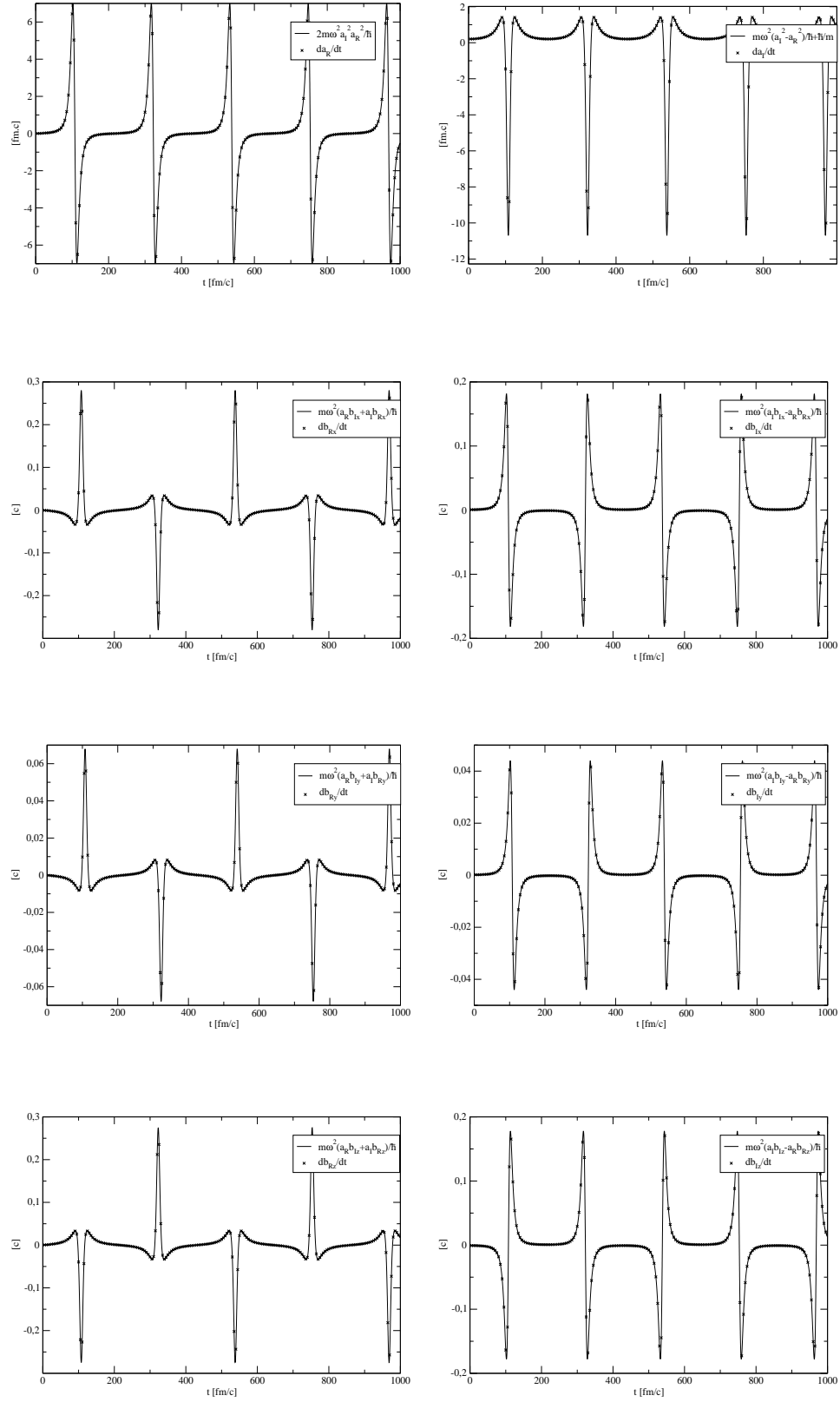


FIG. 4.6 – Dérivée temporelle de chacun des paramètres (croix), ainsi que les expressions des membres de gauche du système d'équations différentielles (4.154).

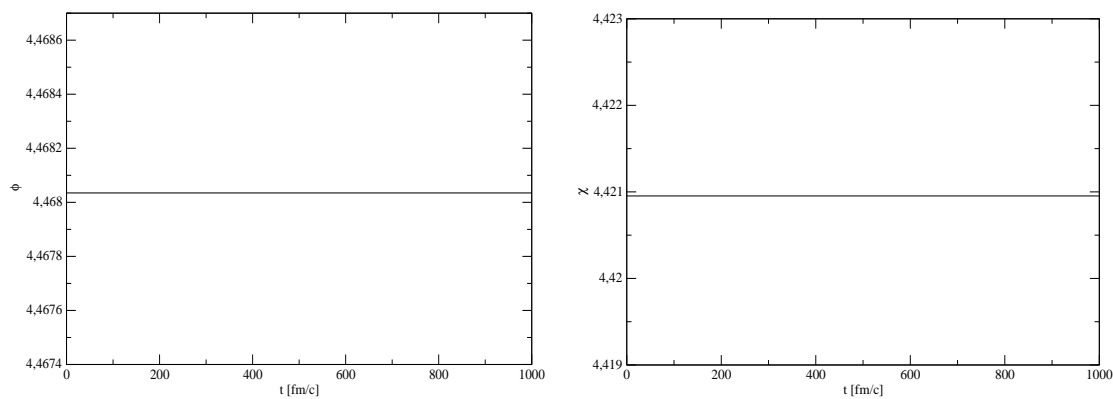


FIG. 4.7 – Evolution temporelle des phases du spin pour une particule provenant d'un système de fermions libres, plongés dans un puit harmonique.

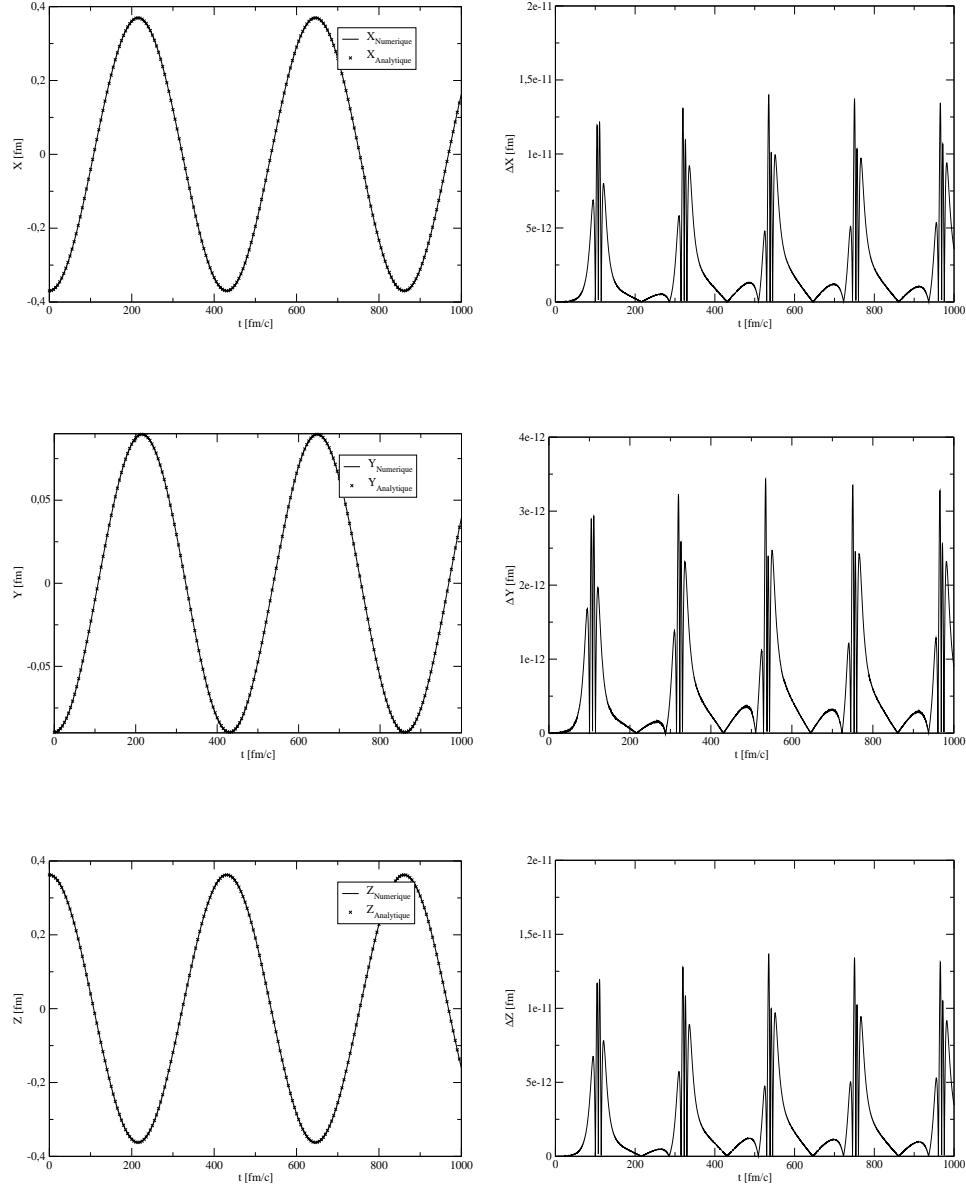


FIG. 4.8 – Les figures de la colonne de gauche représentent l'évolution temporelle des composantes  $X, Y$ , et  $Z$  des positions  $\vec{r}_k$  d'une particule provenant d'un système de fermions plongé dans un puit harmonique. Les lignes en traits pleins représentent la solution numérique, et les croix donnent les solutions analytiques. L'erreur absolue est représentée sur les figures de la colonne de droite pour chacune des observables. Le pas d'intégration est  $\Delta t = 0.05 \text{ fm/c}$ .

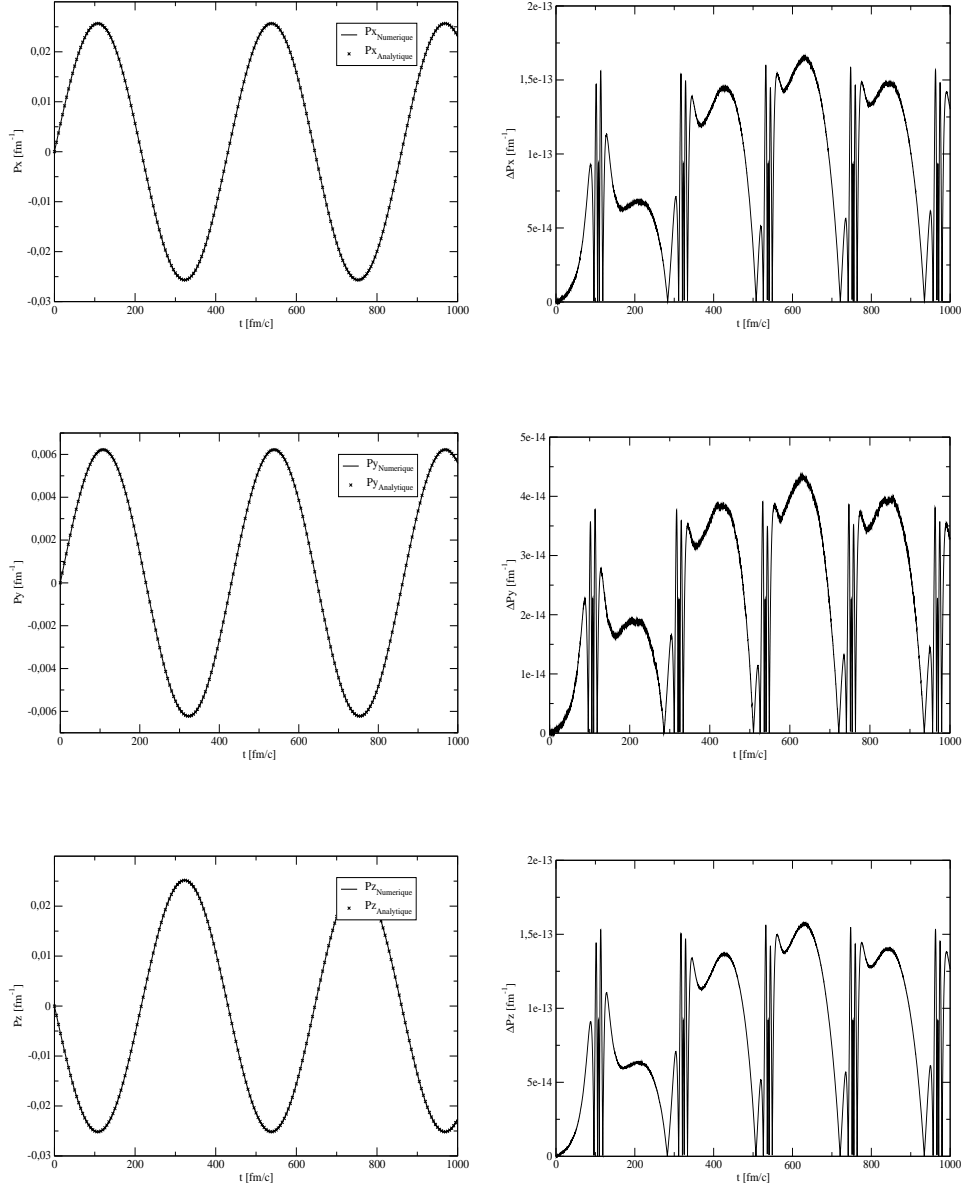


FIG. 4.9 – Les figures de la colonne de gauche représentent l'évolution temporelle des composantes  $P_x, P_y$ , et  $P_z$  des impulsions  $\vec{p}_k$  d'une particule provenant d'un système de fermions plongé dans un puit harmonique. Les lignes en traits pleins représentent la solution numérique, et les croix donnent les solutions analytiques. L'erreur absolue est représentée sur les figures de la colonne de droite pour chacune des observables. Le pas d'intégration est  $\Delta t = 0.05 \text{ fm}/c$ .

### Test du modèle pour un système nucléaire.

Nous allons maintenant réaliser des tests qui nous donneront des indications sur la bonne implémentation de la fonctionnelle de Skyrme pour notre modèle. Nous pourrions vérifier d'une part la conservation de l'énergie totale du système, et d'autre part la restauration de l'invariance Galiléenne. Le Hamiltonien total du système nucléaire est donné comme la somme d'une partie cinétique et d'une partie contenant le potentiel de Skyrme tel que :

$$\hat{H}_{\text{Total}} = \hat{H}_{\text{Cin}} + \hat{H}_{\text{Skyrme}} \quad (4.156)$$

où nous ne tiendrons pas compte de l'énergie d'interaction Coulombienne pour l'instant. Nous discuterons son implémentation pour les noyaux finis lors du prochain chapitre. Pour cette sous-partie, nous effectuerons l'ensemble de nos calculs avec la paramétrisation de Skyrme de type SLy4d. Afin de tester l'invariance Galiléenne du système nucléaire, l'idée générale est d'utiliser un noyau atomique dont le centre de masse est en mouvement rectiligne et uniforme, et d'appliquer à un moment donné un boost Galiléen, tout en vérifiant que l'énergie d'interaction nucléaire n'est pas affectée par celui-ci. Nous effectuerons aussi le même test sans implémenter la densité de courant  $\vec{J}$  dans la fonctionnelle de Skyrme, afin de constater qu'il existe une violation de l'invariance Galiléenne sous l'effet d'un boost. Il faudra également veiller à ce que la relation :

$$m \frac{d\vec{R}_{\text{CM}}}{dt} = \vec{P}_{\text{CM}} \quad (4.157)$$

soit toujours respectée à tout instant, où  $\vec{R}_{\text{CM}}$  et  $\vec{P}_{\text{CM}}$  représentent respectivement la position et la quantité de mouvement du centre de masse du noyau.

Les figures (4.11) et (4.10) montrent respectivement l'évolution temporelle des différentes composantes de l'énergie totale d'un noyau de carbone 12, ainsi que les différentes quantités de ce dernier permettant de vérifier la relation (4.157). Deux types de calculs sont considérés, l'un tenant compte de la restauration de l'invariance Galiléenne, et l'autre l'ignorant en omettant la densité de courant  $\vec{J}$  de la fonctionnelle de Skyrme. On peut remarquer à l'aide des figures (4.11) que l'énergie totale du système est toujours conservée dans chacun des deux cas, sauf au moment où l'on réalise le boost. Ce qui est tout à fait normal car nous avons communiqué une quantité d'énergie cinétique supplémentaire au système afin de réaliser le boost, et ce qui explique les discontinuités observées pour les énergies cinétique et totale du système. Si l'on regarde maintenant l'évolution temporelle de l'énergie d'interaction nucléaire, on peut constater que celle-ci reste constante pour un système invariant sous l'effet d'une transformation de Galilée, et qu'elle n'admet aucune discontinuité au moment du boost. Ces conditions ne sont plus vérifiées pour cette dernière, si l'on regarde le calcul où nous avons omis la densité de courant  $\vec{J}$ . Les figures (4.10) montrent clairement que la relation (4.157), qui reflète l'invariance sous une transformé de Galilée, est uniquement respectée à tout instant seulement pour le cas où la densité de courant  $\vec{J}$  est considérée.

Nous avons ainsi donné des indications permettant de supposer que la fonctionnelle de Skyrme a été correctement implémentée dans notre code de calcul. Notre argumentation sera d'autant plus appuyée par la suite, lorsque nous effectuerons des calculs de structure nucléaire au cours du prochain chapitre. Nous allons maintenant passer à la réalisation numérique du modèle statique.

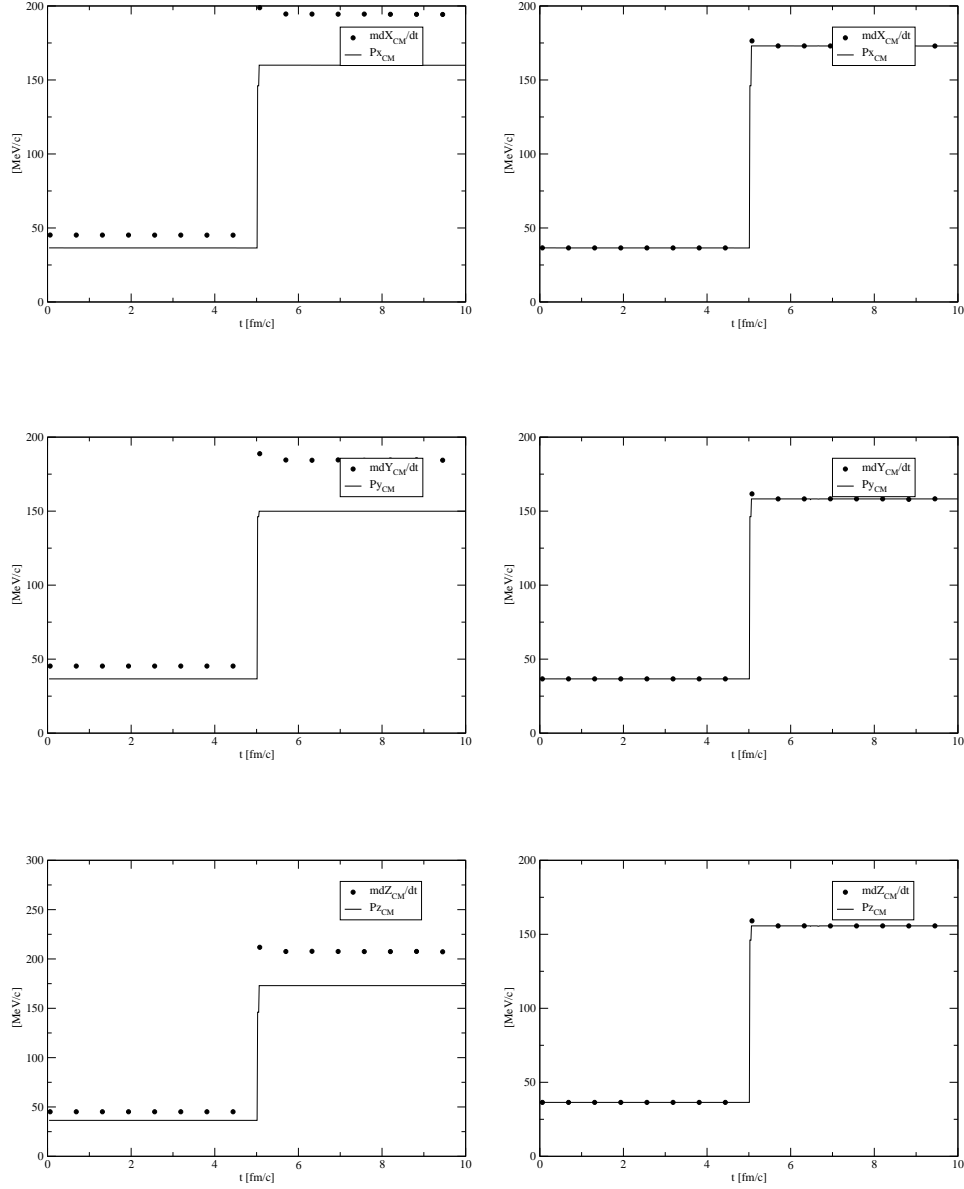


FIG. 4.10 – Evolution temporelle des composantes  $Px_{CM}, Py_{CM},$  et  $Pz_{CM}$  (en traits pleins), ainsi que des quantités  $m \frac{dX_{CM}}{dt}, m \frac{dY_{CM}}{dt},$  et  $m \frac{dZ_{CM}}{dt}$  (en cercles pleins) pour le centre de masse d'un noyau de carbone 12. Les colonnes de droite et gauche représentent respectivement des calculs réalisés avec et sans la restauration de l'invariance Galiléenne, pour lesquelles un boost Galiléen est opéré à  $t=10 \text{ fm/c}$ . On remarque que la relation  $m \frac{d\vec{R}_{CM}}{dt} = \vec{P}_{CM}$  est parfaitement respectée même après avoir réalisé un boost Galiléen, uniquement lorsque l'on tient compte des composantes de la fonctionnelle de Skyrme permettant la restauration de l'invariance Galiléenne.

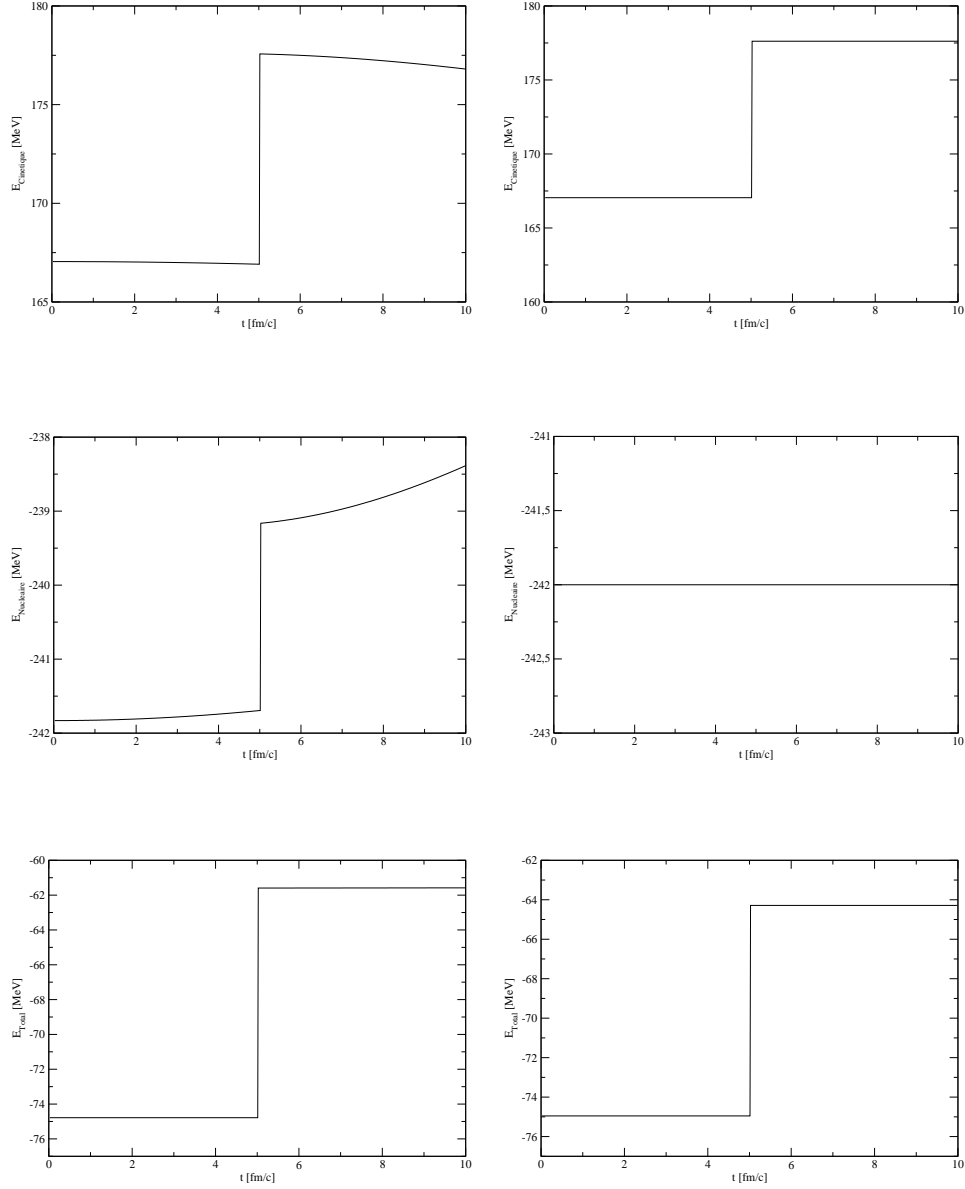


FIG. 4.11 – Evolution temporelle des énergies cinétique, nucléaire, et totale pour un noyau de carbone 12, avec (colonne de droite) et sans (colonne de gauche) la restauration de l'invariance Galiléenne. On peut remarquer pour les deux cas, que l'énergie totale admet une discontinuité au moment du boost à  $t=10\text{fm/c}$ , mais qu'elle est parfaitement conservée avant et après ce dernier. Si l'on tient compte des composantes de la fonctionnelle de Skyrme permettant la restauration de l'invariance Galiléenne, l'énergie d'interaction nucléaire reste constante au court du temps, et seule l'énergie cinétique du système est affectée par le boost Galiléen. Ce qui n'est pas le cas si on ne tient pas compte des corrections, où l'on peut remarquer que l'énergie d'interaction nucléaire admet une discontinuité au moment du boost Galiléen.

### 4.6.2 Le modèle statique.

La résolution de l'équation d'évolution (4.14) pour une solution stationnaire correspond à trouver l'état fondamental d'un système de fermions, qu'il soit ou non en interaction. Ceci est vérifié si et seulement si les dérivées de l'énergie totale du système par rapport à chacun des paramètres sont nulles :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\mu} = 0 \quad \forall \mu \quad (4.158)$$

Une méthode simple permettant de trouver cet état fondamental est d'initialiser aléatoirement tous les paramètres des gaussiennes, et ensuite d'appliquer une méthode dite de gradient d'ordre un afin de refroidir progressivement le système jusqu'à l'état fondamental. Le schéma itératif de cette méthode est donné pour la  $n^{\text{ème}}$  itération par :

$$q_\mu^{(n)} = q_\mu^{(n-1)} - \lambda \frac{\partial \mathcal{H}(Q^{(n-1)})}{\partial q_\mu^{(n-1)}} \quad (4.159)$$

où  $\lambda$  est une variable, qui représente la “viscosité” numérique. Elle est initialement fixée à des valeurs petites, et progressivement augmentée au cours des itérations jusqu'à atteindre la convergence. Le cas le plus simple à étudier, et qui va nous permettre de tester cette méthode, est de reconsidérer le cas de l'oscillateur harmonique pour lequel on connaît exactement l'état fondamental. Pour ce cas bien connu, l'énergie par particule est donnée par :

$$E = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad (4.160)$$

où les  $n_i$  représentent les nombres quantiques d'excitation. Pour un système de bosons, l'état fondamental sera caractérisé par des nombres quantiques d'excitation identiquement nuls pour toutes les particules. Dans le cas du modèle FMD, nous sommes en présence de fermions, et l'on ne peut avoir de particules possédant le même état quantique. On va donc peupler progressivement chacun des niveaux, où chacun pourra être occupé par deux particules identiques, à cause de la dégénérescence du spin 1/2 des particules. Si l'on considère l'exemple de quatre fermions identiques, l'état fondamental sera donné par deux particules ayant une énergie égale à  $\frac{3}{2}\hbar\omega$ , et les deux suivantes avec une énergie égale à  $\frac{5}{2}\hbar\omega$ , soit une énergie totale égale à  $8\hbar\omega$ . La résolution numérique de ce problème est présentée en figure (4.12). Cette figure montre qu'il y a un très bon accord entre la valeur numérique et la valeur théorique de l'énergie du fondamental, et ceci est obtenu avec une convergence assez rapide. Un autre test intéressant à effectuer pour vérifier la bonne convergence de l'algorithme, est de regarder si le centre de masse du système converge vers zéro. La figure (4.13) démontre que cette condition est parfaitement respectée pour le cas étudié.



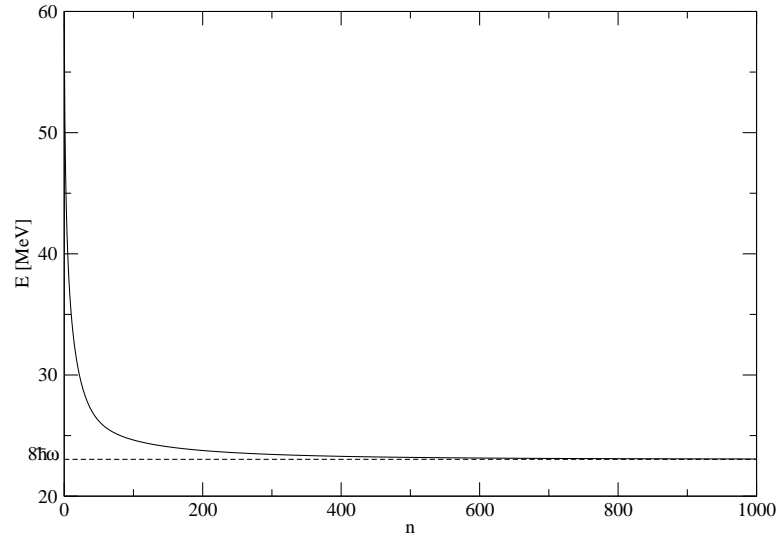


FIG. 4.12 – Evolution du refroidissement d'un système de quatre fermions libres plongés dans un puit harmonique, où  $\hbar\omega = 2,88\text{MeV}$ .  $n$  représente le nombre d'itérations.

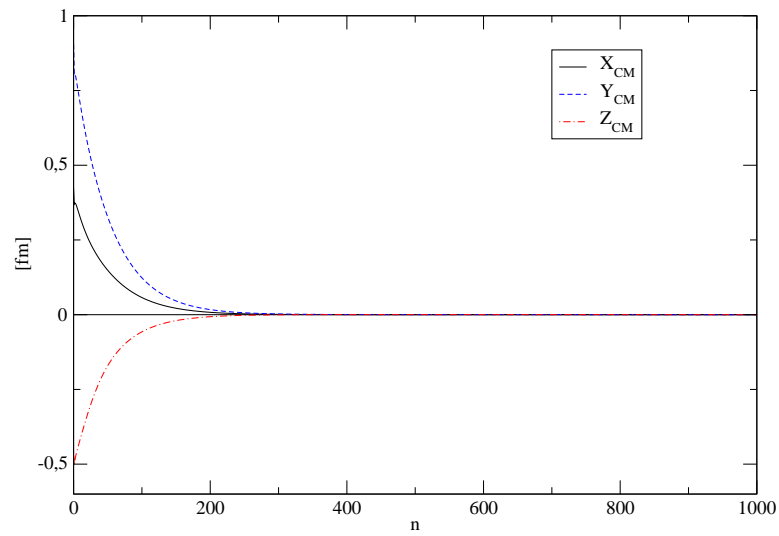


FIG. 4.13 – Evolution de la position du centre de masse au cours de l'évolution temporelle.

## 4.7 Conclusion.

Au cours de ce chapitre, nous avons re-dérivé les équations du modèle FMD dans un formalisme Skyrme Hartree-Fock. Nous avons établi les différentes connexions qui existent entre celui-ci et le modèle TDHF. Nous avons spécifiquement démontré que résoudre les équations de mouvement pour le modèle FMD est équivalent à résoudre les équations TDHF. Cette équivalence nous a permis d'affirmer que la connaissance de l'évolution dynamique de l'opérateur densité à un corps était suffisante pour la résolution des équations FMD. Ceci implique en particulier que le calcul de toute observable dans FMD, peut se réduire au calcul de fonctionnelles de l'opérateur densité à un corps, et par conséquence avoir un effort numérique de l'ordre de  $A^2$ . Bien que le modèle FMD peut être perçu comme une restriction du modèle TDHF à cause du fait que les états à une particule sont imposés comme étant des gaussiennes, celui-ci permettra néanmoins de reproduire les fortes fluctuations de densité de l'écorce des étoiles à neutrons. Nous avons par la suite proposé une méthode systématique permettant d'obtenir relativement simplement la dérivation du champ moyen. Afin de contrôler la bonne réalisation numérique de notre modèle, de nombreux tests ont été établis à l'aide de cas modèle. Des critères supplémentaires ont été utilisés par la suite afin de valider l'implémentation de la fonctionnelle de Skyrme. Avant de réaliser toute étude thermodynamique avec notre modèle, nous allons tout d'abord l'appliquer à des calculs de structure nucléaire. Ce qui fera l'objet du prochain chapitre.



# Chapitre 5

## Application du modèle FMD à la structure nucléaire.

### 5.1 Introduction.

Au cours du chapitre précédent, nous avons développé un modèle FMD qui a été conçu pour être essentiellement utilisé à des fins astrophysiques, et plus particulièrement pour étudier la thermodynamique de la croûte interne des étoiles et protoétoiles à neutrons. Néanmoins ce modèle n'est pas restreint à ce domaine, et ce chapitre a pour but de présenter certains exemples d'application à la structure nucléaire. Durant ces dernières années le modèle AMD strictement apparenté au modèle FMD a été combiné à la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [57], dans le but d'étudier la structure des noyaux légers [111, 112, 113]. La méthode GCM consiste à faire des projections sous contrainte des différents états possibles d'un noyau, et de moyenner l'ensemble de ces états de telle sorte à introduire des corrélations au delà du champ moyen. Ces applications sont bien au delà des ambitions de ce travail, et nous nous limiterons dans ce chapitre à extraire des états fondamentaux de certains noyaux bien connus. Ces fondamentaux pourront être comparés à ceux obtenus à l'aide de l'expérience, et du modèle Hartree-Fock bien établi. Cette comparaison pourra être vue comme un test confirmant la validité de notre modèle. Un autre travail qui n'a jamais été réalisé à l'aide des modèles AMD/FMD, est celui concernant l'étude des modes collectifs dans les noyaux. Ces derniers ont été intensivement étudiés à l'aide du modèle TDHF, et de la RPA [57, 114] qui n'est rien d'autre qu'un TDHF linéarisé. Les modes collectifs restent à l'heure actuelle un sujet d'actualité, et certains d'entre eux permettent d'obtenir des informations expérimentales sur l'équation d'état de la matière nucléaire. Les résonances géantes monopolaires en sont un exemple, elles permettent l'extraction du coefficient d'incompressibilité de la matière nucléaire. Les modèles AMD/FMD peuvent donc être une approche supplémentaire à l'étude des modes collectifs, et l'ensemble des résultats obtenus à l'aide de ces derniers pourront être confrontés à ceux obtenus à l'aide des modèles TDHF et RPA. Nous aborderons donc dans la dernière partie de ce chapitre, la réalisation de calculs théoriques de mouvements collectifs dans les noyaux à l'aide de FMD, et nous nous concentrerons essentiellement sur l'étude des résonances géantes monopolaires. Nous verrons que le modèle FMD présente certaines limitations si l'on cherche à étudier ce mode spécifique, mais qu'il pourra être utilisé plus efficacement pour d'autres modes collectifs.

Néanmoins avant de réaliser tout calcul de structure nucléaire, nous allons commencer

ce chapitre par la résolution numérique de l'équation de Poisson, qui va nous permettre d'implémenter l'interaction Coulombienne dans les noyaux.

## 5.2 Implémentation de l'interaction Coulombienne pour les noyaux finis.

### 5.2.1 Principe de la méthode.

Nous avons vu au cours du chapitre précédent que la manière la plus astucieuse d'implémenter l'interaction Coulombienne est d'utiliser l'équation de Poisson, ce qui va nous donner le terme direct de l'énergie Coulombienne, et que le terme d'échange peut être estimé à l'aide de l'approximation de Slater. Jusqu'à présent, nous n'avons donné aucune information technique sur la résolution de l'équation de Poisson, but principal de cette sous-partie. L'équation de Poisson est une équation locale définie par :

$$\Delta V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = -4\pi\alpha\hbar c\rho_c(\vec{r}) \quad (5.1)$$

à partir de laquelle on peut en extraire le potentiel Coulombien  $V_{\text{Coul}}(\vec{r})$ , si l'on connaît la densité de charge locale, qui dans notre cas est identiquement égale à la densité de charge protonique,  $\rho_c(\vec{r}) = \rho_p(\vec{r})$ . Sa résolution nécessite de fixer les conditions aux bords. En ce qui concerne le cas d'un noyau fini, le potentiel Coulombien doit être nul à l'infini :

$$\lim_{\vec{r} \rightarrow +\infty} V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = 0 \quad (5.2)$$

La résolution de l'équation de Poisson peut se faire à l'aide de la méthode des différences finies [109, 110]. Le schéma d'ordre deux à une dimension de l'équation (5.1) s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i}{\Delta x^2} = -4\pi\alpha\hbar c\rho_{c,i} \quad (5.3)$$

où les  $v_i$  et les  $\rho_{c,i}$  sont respectivement les valeurs du potentiel Coulombien et de la densité de charge sur le réseau discrétisé, et  $\Delta x$  le pas du réseau. Ce schéma peut être étendu à des ordres supérieurs, et à plusieurs dimensions, mais nous nous contenterons pour l'instant de ce schéma pour expliquer le principe de notre méthode de résolution. Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre précédent, nos calculs FMD sont discrétisés sur un réseau de volume  $V$ , sur lequel les différentes densités sont tabulées dans le but de calculer la fonctionnelle de Skyrme. Afin de respecter la condition (5.2), ce réseau devra être suffisamment étendu pour imposer les bonnes conditions aux bords pour le potentiel Coulombien. Avec cette condition, l'équation (5.3) devient un système d'équations linéaires qui peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

avec  $f_i = -4\pi\alpha\hbar c\Delta x^2\rho_{c,i}$ . La taille finie du réseau devra être suffisamment grande pour reproduire les bonnes conditions aux limites. Le système linéaire d'équations (5.4) peut s'écrire sous une forme plus compacte :

$$C\vec{v} = \vec{f} \quad (5.5)$$

et sachant que la matrice  $C$  n'est pas singulière, on pourrait trouver les différentes valeur du potentiel sur le réseau à l'aide de la matrice inverse. Pour des raisons de rapidité numérique, nous n'inverserons pas cette matrice, et nous emploierons une méthode itérative. Le schéma itératif est le suivant :

$$\vec{v}^{(l)} = \frac{1}{2} \left( D\vec{v}^{(l-1)} - \vec{f} \right) \quad (5.6)$$

où  $D = C + 2I$ , et  $\vec{v}^{(l)}$  le potentiel Coulombien à la  $l$ -ème itération. L'idée de cette méthode est de partir d'une condition initiale arbitraire  $\vec{v}^{(0)}$ , et d'appliquer l'équation (5.6) jusqu'à convergence. En effet si nous appliquons la matrice  $C$  à l'équation (5.6), nous obtenons :

$$C\vec{v}^{(l)} = 2 \left( \vec{v}^{(l)} - \vec{v}^{(l-1)} \right) + \vec{f} \quad (5.7)$$

et si nous vérifions la relation  $|\vec{v}^{(l)} - \vec{v}^{(l-1)}| < \varepsilon$  à la convergence, où  $\varepsilon$  est une quantité infinitésimale, alors la solution trouvée pour  $\vec{v}^{(l)}$  sera celle qui respectera le système d'équations (5.4). Nous allons maintenant passer aux applications numériques de cette méthode.

### 5.2.2 Application numérique.

Nous devons maintenant passer aux applications numériques de la méthode, pour le cas des noyaux finis dans un réseau à trois dimensions. Le schéma d'ordre 2 régi par l'équation (5.3) se généralise à trois dimensions par :

$$v_{i+1,j,k} + v_{i-1,j,k} + v_{i,j+1,k} + v_{i,j-1,k} + v_{i,j,k+1} + v_{i,j,k-1} - 6v_{i,j,k} = f_{i,j,k} \quad (5.8)$$

Si l'on souhaite une résolution à l'ordre 4, il faut calculer :

$$\begin{aligned} & 16(v_{i+1,j,k} + v_{i-1,j,k} + v_{i,j+1,k} + v_{i,j-1,k} + v_{i,j,k+1} + v_{i,j,k-1}) - 90v_{i,j,k} = 12f_{i,j,k} \\ & - (v_{i+2,j,k} + v_{i-2,j,k} + v_{i,j+2,k} + v_{i,j-2,k} + v_{i,j,k+2} + v_{i,j,k-2}) \end{aligned} \quad (5.9)$$

où les indices  $i, j, k$  indiquent la position sur le réseau à trois dimensions. Nous allons appliquer ces deux schémas d'intégration, et comparer l'erreur commise pour chacune des deux méthodes. Les équations (5.8) et (5.9) peuvent être retranscrites à l'aide du schéma itératif défini par l'équation (5.6), et on aura à l'ordre 2 l'expression du potentiel pour chaque point du réseau à la  $l$ -ème itération :

$$v_{i,j,k}^{(l)} = \frac{1}{2} \left[ v_{i+1,j,k}^{(l-1)} + v_{i-1,j,k}^{(l-1)} + v_{i,j+1,k}^{(l-1)} + v_{i,j-1,k}^{(l-1)} + v_{i,j,k+1}^{(l-1)} + v_{i,j,k-1}^{(l-1)} - 4v_{i,j,k}^{(l-1)} - f_{i,j,k} \right] \quad (5.10)$$

et de même pour la méthode d'ordre 4 :

$$\begin{aligned} v_{i,j,k}^{(l)} &= \frac{8}{25} \left( v_{i+1,j,k}^{(l-1)} + v_{i-1,j,k}^{(l-1)} + v_{i,j+1,k}^{(l-1)} + v_{i,j-1,k}^{(l-1)} + v_{i,j,k+1}^{(l-1)} + v_{i,j,k-1}^{(l-1)} \right) \\ & - \frac{1}{50} \left( v_{i+2,j,k}^{(l-1)} + v_{i-2,j,k}^{(l-1)} + v_{i,j+2,k}^{(l-1)} + v_{i,j-2,k}^{(l-1)} + v_{i,j,k+2}^{(l-1)} + v_{i,j,k-2}^{(l-1)} \right) \\ & - \frac{4}{5} v_{i,j,k}^{(l-1)} - \frac{6}{25} f_{i,j,k} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Une fois la convergence atteinte pour le potentiel en tout point du réseau, on pourra calculer le terme direct de l'interaction Coulombienne. Un test numérique permettant de valider notre méthode consiste à calculer ce dernier avec deux méthodes différentes. La première consiste à le calculer directement par la relation suivante :

$$E_1 = \int \rho_c(\vec{r}) V_{\text{Coul}}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (5.12)$$

et la deuxième en passant par l'estimation du champ électrique :

$$E_2 = \frac{\varepsilon_0}{2} \int \vec{E}_{\text{Coul}}^2(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad \text{où} \quad \vec{E}_{\text{Coul}}(\vec{r}) = -\overrightarrow{\text{grad}}(V_{\text{Coul}}(\vec{r})) \quad (5.13)$$

Si l'erreur relative  $\varsigma = |E_1 - E_2|/E_1$  est suffisamment faible, alors on pourra considérer notre méthode comme étant valide. Les tableaux (5.1), (5.2), (5.3), et (5.4) sont des exemples d'application numérique de la méthode itérative pour des protons disposés de manière aléatoire sur un réseau à trois dimensions. Le tableau (5.1) représente des calculs effectués pour deux protons à l'aide de la méthode d'ordre 2. On remarque que l'erreur  $\varsigma$  diminue, lorsque l'on augmente la taille du réseau, et ceci s'explique par le fait que l'on respecte de mieux en mieux la condition (5.2). Néanmoins, le temps de calcul augmente proportionnellement à  $L^3$ . Ceci implique que du point de vue pratique, les calculs deviennent ingérables à partir de  $L \geq 112$ . Si le même calcul est effectué avec la méthode d'ordre 4, où les résultats sont présentés dans le tableau (5.2), on peut remarquer que la convergence avec la taille du réseau est beaucoup plus rapide, et que l'erreur  $\varsigma$  est très inférieur au pourcent. De plus, les temps de calcul numérique sont inférieurs à ceux associés à la méthode d'ordre 2. La même étude est présentée dans les tableaux (5.3), et (5.4) pour un système constitué de six protons. Les conclusions sont identiques par rapport au cas précédent. Pour nos futurs calculs concernant les noyaux finis, nous n'utiliserons que la méthode d'ordre 4 qui est plus précise et plus rapide que la méthode d'ordre 2.

Nous avons présenté le dernier ingrédient manquant permettant de faire des calculs de structure nucléaire. Notre prochaine section sera consacrée à l'étude des états fondamentaux de quelques noyaux atomiques bien connus.

$L$	16	48	80	112
$E_1$ (MeV)	0.731	0.932	0.973	0.99
$E_2$ (MeV)	0.684	0.899	0.941	0.956
erreur relative (%)	6.45	3.5	3.21	3.12

TAB. 5.1 – Estimation du terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne, à l'aide de la méthode itérative d'ordre 2. Pour deux protons placés aléatoirement sur le réseau on calcule  $E_1$  et  $E_2$  à l'aide des relations (5.12), et (5.13).  $L$  indique la dimension linéaire du réseau de calcul.

$L$	16	48	80	112	144
$E_1$ (MeV)	0.719	0.922	0.963	0.98	0.98
$E_2$ (MeV)	0.707	0.917	0.959	0.977	0.987
erreur relative (%)	2.12	0.46	0.34	0.31	0.3

TAB. 5.2 – Estimation du terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne, à l'aide de la méthode itérative d'ordre 2. Pour deux protons placés aléatoirement sur le réseau on calcule  $E_1$  et  $E_2$  à l'aide des relations (5.12), et (5.13).  $L$  indique la dimension linéaire du réseau de calcul.

$L$	16	48	80	112
$E_1$ (MeV)	7.038	8.803	9.169	9.328
$E_2$ (MeV)	6.596	8.486	8.863	9.025
erreur relative (%)	6.3	3.61	3.34	3.25

TAB. 5.3 – Estimation du terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne, à l'aide de la méthode itérative d'ordre 2. Pour deux protons placés aléatoirement sur le réseau on calcule  $E_1$  et  $E_2$  à l'aide des relations (5.12), et (5.13).  $L$  indique la dimension linéaire du réseau de calcul.

$n$	16	48	80	112	144
$E_1$ (MeV)	6.966	8.744	9.112	9.271	9.271
$E_2$ (MeV)	6.832	8.704	9.08	9.241	9.243
erreur relative (%)	1.94	0.46	0.36	0.33	0.31

TAB. 5.4 – Estimation du terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne, à l'aide de la méthode itérative d'ordre 4. Pour six protons placés aléatoirement sur le réseau on calcule  $E_1$  et  $E_2$  à l'aide des relations (5.12), et (5.13).  $L$  indique la dimension linéaire du réseau de calcul.

### 5.3 Etude des états fondamentaux de quelques noyaux.

L'étude des états fondamentaux des noyaux atomiques est couramment réalisée à l'aide de la méthode Hartree-Fock. L'idée de cette partie est de réaliser les mêmes types de calculs à l'aide du modèle FMD. Nous avons vu dans le chapitre précédent que le modèle FMD est équivalent à une approche TDHF, où les états à une particule sont imposés comme étant gaussiens de telle sorte à localiser les particules dans l'espace des phases. La localisation des particules revient qualitativement à introduire dans la fonction d'onde des corrélations classiques ; ceci est une caractéristique intéressante de FMD en ce qui concerne la capacité de décrire des distributions dishomogènes de densité et des fragments. Néanmoins on peut aussi s'inquiéter des possibles limites de la forme imposée à la fonction d'onde. L'ansatz gaussien revient à limiter fortement l'espace variationnel accessible aux déterminants de Slater, et il n'est pas a priori clair si cette dégradation d'Hartree-Fock aura des influences importantes sur les observables. Afin de répondre à cette question, nous allons réaliser plusieurs calculs pour différents noyaux dont les fondamentaux sont très bien connus aussi bien d'un point de vue expérimental, que d'un point de vue théorique à l'aide de la méthode



Hartree-Fock, et nous comparerons nos résultats à ces derniers. Les états fondamentaux obtenus pour le modèle Hartree-Fock ont été calculés par B. Avez *et al.* [115], à l'aide du code développé par K. Bennaceur [116]. Afin de décrire les états fondamentaux de FMD, nous allons appliquer le modèle statique développé dans le chapitre précédent. Le Hamiltonien total devra être composé de la partie cinétique, avec la soustraction du mouvement du centre de masse à un corps, de la fonctionnelle de Skyrme, et du terme d'interaction Coulombienne. Nous utiliserons deux fonctionnelles de Skyrme, la paramétrisation SIII et celle de Saclay-Lyon. L'ensemble des tableaux (5.5), (5.6), (5.7), (5.8), (5.9), et (5.10) présente l'énergie du fondamental pour les différents noyaux avec le modèle Hartree-Fock usuel, et le modèle FMD, et ceci pour les deux types de fonctionnelle. Les valeurs expérimentales [117] sont également présentées lorsque cela est possible. La quantité  $R_{\text{rms}}$  représente le rayon de charge défini par :

$$R_{\text{rms}}^2 = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^A \langle Q_{\text{GS}} | (\hat{r}_i - \hat{r}_{\text{CM}})^2 \hat{\kappa}_p | Q_{\text{GS}} \rangle + R_{\text{proton}}^2 \quad (5.14)$$

où  $|Q_{\text{GS}}\rangle$  est la fonction d'onde total de l'état fondamental,  $\hat{\kappa}_p$  l'opérateur qui réalise la projection sur les états d'isospin protonique,  $R_{\text{proton}}^2 = 0.876 \text{ fm}^2$  prends en compte le rayon de charge fini du proton, et  $\hat{r}_{\text{CM}}$  représente la position du centre de masse du noyau défini par :

$$\hat{r}_{\text{CM}} = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \hat{r}_i \quad (5.15)$$

L'ensemble des résultats est en général en très bon accord avec Hartree-Fock. Bien que la paramétrisation SIII ne soit pas réaliste, les deux modèles donnent des résultats proches des résultats expérimentaux, et l'accord avec l'expérience est amélioré en utilisant la paramétrisation de Saclay-Lyon, ce qui semble tout à fait cohérent vues les contraintes qui ont été imposées lors de sa construction. En effet l'interaction de Saclay-Lyon a été optimisée sur les mesures de masse des noyaux stables et exotiques, et sur les calculs ab-initio de la matière de neutrons ; SIII est une des toutes premières interaction de Skyrme pour laquelle pratiquement seulement la contrainte de saturation de la matière nucléaire symétrique, ainsi que les masses de quelques noyaux magiques ont été considérés. Néanmoins l'accord obtenu avec le modèle FMD est légèrement inférieur à celui du modèle Hartree-Fock. Cela s'explique par le fait que pour ce dernier, les états à une particule prennent la forme qui correspond exactement à la solution du champ moyen, ce qui n'est pas le cas pour le modèle FMD où ils sont restreints à être gaussiens. De plus, il faut rappeler que lors de la construction de notre modèle, nous avons négligé les parties de la fonctionnelle qui tenaient compte du terme de spin-orbite, et de spin-gradient.

Commentons maintenant l'ensemble des résultats pour le modèle FMD. Les profils de densité pour les protons et les neutrons représentés par les figures (5.1), montrent que pour le noyaux d'hélium 4, le modèle FMD donne une solution qui correspond à une superposition de quatre gaussiennes, dont les centroïdes sont situés au même point de l'espace. Ceci est possible à cause de la dégénérescence en spin et en isospin.

Les figures (5.2) représentent les profils de densité neutron et proton pour le noyau de lithium 6. On peut remarquer que ce dernier présente une déformation. Le fait d'avoir ajouté un neutron et un proton par rapport au noyau d'hélium 4, conduit à un déplacement de deux neutrons et de deux protons par rapport au centre de masse, car deux nucléons de

même espèce ayant la même orientation du spin ne peuvent être situés au même endroit de l'espace, donc occuper la même orbitale.

Bien que le noyau de béryllium 8 ne soit pas en réalité un état lié, mais une résonance dont la décroissance est constituée de deux particules  $\alpha$ , le modèle FMD obtient un état lié de deux particules  $\alpha$ , ce qui est clairement visible sur les profils de densité donnés par les figures (5.3). Cela explique également pourquoi nous n'obtenons pas exactement l'énergie de la résonance, et pourquoi nous pouvons dans notre cas définir un rayon de charge qui n'existe pas dans la réalité. Nous pouvons toutefois remarquer à partir du tableau (5.5) que un état constitué de deux particules alpha à l'infini correspond à une énergie  $E_{2\alpha} = 52.312\text{MeV} < E_{Be^8}$ . Ceci signifie que l'état trouvé n'est pas véritablement l'état fondamental du béryllium 8, mais plutôt un état excité : le modèle statique dans ce cas présent semble ne pas avoir correctement convergé au minimum de l'énergie, ce qui indique la présence d'un problème numérique.

Concernant le noyau de carbone 12, le modèle FMD donne un résultat qui est très loin de ceux que l'on pourrait obtenir expérimentalement, ou à l'aide du modèle Hartree-Fock. La différence d'énergie obtenue s'explique en grande partie par le fait que prendre des états gaussiens pour les états à une particule, conduit à une très grande probabilité de trouver des noyaux caractérisés par des états clusters de particule  $\alpha$ . Ce qui est tout à fait le cas pour le carbone 12, où les figures (5.4) montrent que l'état fondamental est trouvé comme étant une configuration triangulaire de trois particules  $\alpha$ . Il peut être intéressant de remarquer que si l'expérience donne un état fondamentale du carbone 12 sphérique, nous avons de fortes indications d'états excités de celui-ci à structure  $\alpha$ , états qui ne sont pas décrits par le modèle Hartree-Fock. Les noyaux d'oxygène 16 et de calcium 40 respectivement représentés par les profils de densité (5.6) et (faire le lien), qui sont pour leurs part trouvés comme des noyaux sphériques, en accord avec l'évidence expérimentale.

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-26.156 \pm 10^{-3}$	$1.973 \pm 10^{-3}$
FMD SIII	$-25.563 \pm 10^{-3}$	$1.943 \pm 10^{-3}$
HF SLy4	-26.7	2.123
HF SIII	-26.587	2.048
Exp	-28.296	1.63

TAB. 5.5 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau d'hélium 4. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD et le modèle Hartree-Fock, avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

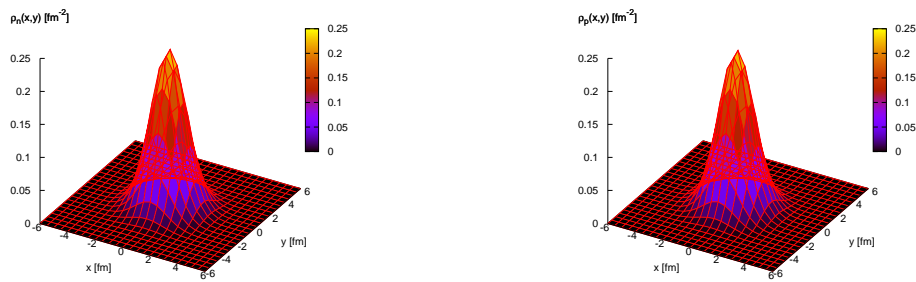


FIG. 5.1 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau d'hélium 4 obtenus avec la paramétrisation SLy4. Il s'agit d'une superposition de quatre gaussiennes, dont les centroïdes sont situés au même point de l'espace.

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-30.225 \pm 10^{-3}$	$2.356 \pm 10^{-3}$
FMD SIII	$-28.966 \pm 10^{-3}$	$2.67 \pm 10^{-3}$
HF SLy4	-32.478	2.249
HF SIII	-32.113	2.151
Exp	-31.99	2.5

TAB. 5.6 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau de lithium 6. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD, et le modèle Hartree-Fock avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

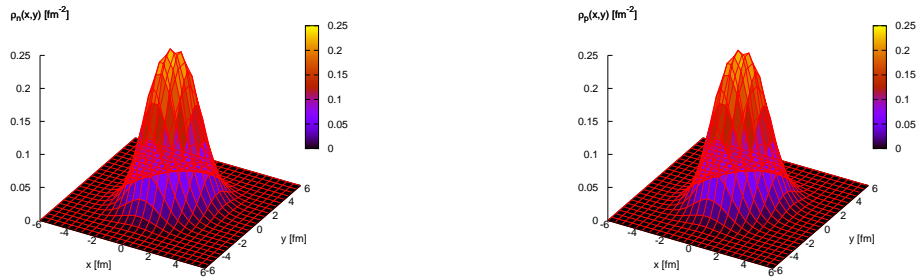


FIG. 5.2 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau de lithium 6 obtenus avec la paramétrisation SLy4. La distribution est allongée, et peut être visualisée comme la superposition de trois particules de deutérium.

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-44.996 \pm 10^{-3}$	$2.686 \pm 10^{-3}$
FMD SIII	$-43.61 \pm 10^{-3}$	$2.589 \pm 10^{-3}$
HF SLy4	-45.439	2.491
HF SIII	-45.314	2.41
Exp	-56.50	

TAB. 5.7 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau de béryllium 8. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD, et le modèle Hartree-Fock avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

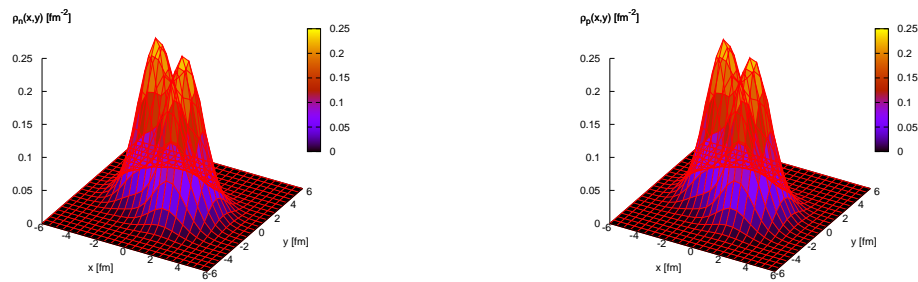


FIG. 5.3 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau de béryllium 8 obtenus avec la paramétrisation SLy4. Ce dernier est obtenu comme étant un état lié de deux particules  $\alpha$ .

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-77.4 \pm 10^{-2}$	$2.715 \pm 10^{-3}$
FMD SIII	$-76.1 \pm 10^{-2}$	$2.648 \pm 10^{-3}$
HF SLy4	-90.578	2.583
HF SIII	-90.8	2.546
Exp	-92.163	2.42

TAB. 5.8 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau de carbone 12. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD, et le modèle Hartree-Fock avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

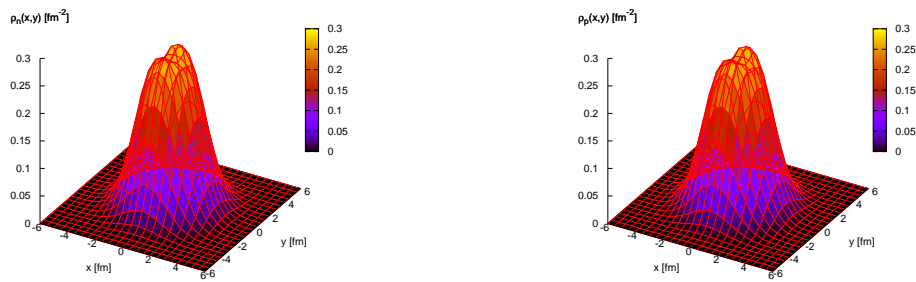


FIG. 5.4 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau de carbone 12 obtenus avec la paramétrisation SLy4. Ce dernier est obtenu comme étant un noyau constitué de trois cluster  $\alpha$ .

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-127.9 \pm 10^{-2}$	$2.77 \pm 10^{-2}$
FMD SIII	$-126.1 \pm 10^{-2}$	$2.74 \pm 10^{-2}$
HF SLy4	-128.485	2.8
HF SIII	-128.21	2.757
Exp	-127.62	2.73

TAB. 5.9 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau d'oxygène 16. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD, et le modèle Hartree-Fock avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

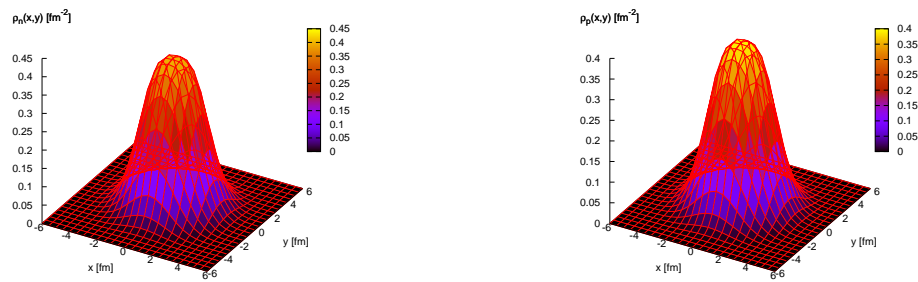


FIG. 5.5 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau d'oxygène 16 obtenus avec la paramétrisation SLy4. La distribution est sphérique.

	$E_{\text{GS}}$ (MeV)	$R_{\text{rms}}$ (fm)
FMD SLy4	$-344.98 \pm 10^{-2}$	$3.52 \pm 10^{-2}$
FMD SIII	$-343.45 \pm 10^{-2}$	$3.53 \pm 10^{-2}$
HF SLy4	-344.22	3.512
HF SIII	-341.855	3.5
Exp	-342.056	3.5

TAB. 5.10 – Tableau récapitulatif donnant l'énergie du niveau fondamental ainsi que le rayon de charge pour le noyau de calcium 40. Ces deux observables sont données pour le modèle FMD, et le modèle Hartree-Fock avec deux paramétrisations de Skyrme différentes. Les valeurs expérimentales sont données dans la dernière ligne du tableau.

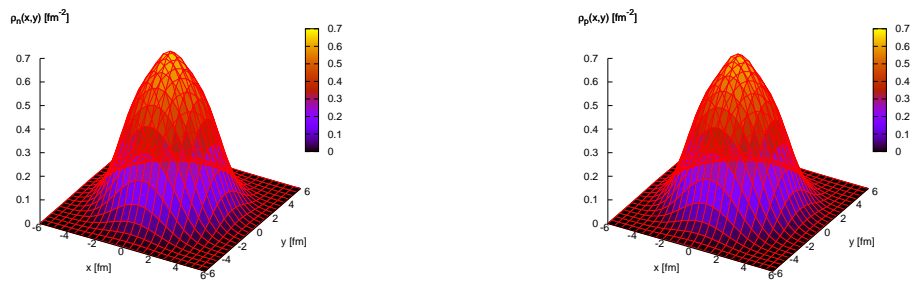


FIG. 5.6 – Profils de densité neutron et proton pour le noyau de calcium 40 obtenus avec la paramétrisation SLy4. La distribution est sphérique.



## 5.4 Etude des résonances géantes monopolaires.

### 5.4.1 Introduction.

La résonance géante monopolaire isoscalaire (ISGMR) est un mode collectif du noyau, dont la multipolarité  $\Delta L = 0$  correspond à une oscillation radiale du noyau dans son ensemble. Ce mode est associé à une compression-dilatation du noyau, aussi connu sous le nom évocateur de “mode respiratoire” du noyau, et il a été découvert expérimentalement par M. Marty *et al.* [118], et D.H. Youngblood *et al.* [119] lors d’expériences de réactions de diffusion élastique de particules légères. L’étude des ISGMR permet une détermination du module d’incompressibilité de la matière nucléaire actuellement estimé à  $K_\infty = 210 \pm 30 \text{ MeV}$  [120, 121]. Dans le but d’améliorer son évaluation, l’étude des ISGMR fait encore l’objet d’intenses travaux, aussi bien d’un point de vue théorique, que d’un point de vue expérimental. L’objet de cette sous-partie est de réaliser des premiers calculs théoriques de ISGMR à l’aide du modèle FMD, de les comparer dans la mesure du possible avec d’autres résultats déjà obtenus soit par l’expérience, soit par des calculs théoriques, et ceci dans le but de déterminer si notre modèle est réaliste en présence de variations importantes de densité, comme celles qui sont explorées par les modes collectifs ainsi que par la clusterisation de la matière d’étoile.

### 5.4.2 Principe de la méthode.

Les modes collectifs peuvent être étudiés à l’aide du modèle FMD en prenant un noyau dans son état fondamental, et en l’excitant à l’aide d’une petite perturbation adaptée au problème considéré. Le Hamiltonien du système est défini par :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{noyau}} + \lambda \hat{O} \delta(t) \quad (5.16)$$

avec  $\lambda \ll 1$ .  $\hat{O}$  est un opérateur permettant d’exciter le système à l’instant initial, vers l’état correspondant au mode collectif étudié.  $\hat{H}_{\text{noyau}}$  est le Hamiltonien du noyau :

$$\hat{H}_{\text{noyau}} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (5.17)$$

où  $E_n$  et  $|n\rangle$  sont respectivement les énergies et états propres du système. Si l’on souhaite réaliser une étude sur les ISGMR, il faudra comprimer le noyau de manière uniforme à l’instant initial, et ceci est réalisé concrètement en plongeant le noyau dans un puits harmonique. L’opérateur correspondant à la perturbation prend donc la forme  $\hat{O} = \hat{r}^2$  pour le cas de l’ISGMR. Etant donné que la perturbation a pour effet d’exciter le noyau de son état fondamental  $|0\rangle$  vers des états excités  $|n\rangle$  correspondant aux modes collectifs, l’évolution temporelle de la fonction d’onde du système au premier ordre est donnée par la théorie des perturbations dépendantes du temps par la relation suivante :

$$|Q(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t} |0\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n e^{-i\omega_n t} |n\rangle \langle n | \hat{O} | 0 \rangle \quad (5.18)$$

où  $\hbar\omega_n = E_n$ . En utilisant les relations (5.18), et (5.17), il en découle que l'énergie du noyau sera une fonction croissante en  $\lambda^2$  où :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{noyau}} &= \langle Q(t) | \hat{H}_{\text{noyau}} | Q(t) \rangle \\
&= \langle 0 | \hat{H}_{\text{noyau}} | 0 \rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n e^{i(\omega_0 - \omega_n)t} \langle 0 | \hat{H}_{\text{noyau}} | n \rangle \langle n | \hat{O} | 0 \rangle - \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n e^{-i(\omega_0 - \omega_n)t} \langle n | \hat{H}_{\text{noyau}} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{O} | n \rangle \\
&\quad + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_n \langle n | \hat{H}_{\text{noyau}} | n \rangle |\langle n | \hat{O} | 0 \rangle|^2 \\
&= E_0 + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_n E_n |\langle n | \hat{O} | 0 \rangle|^2
\end{aligned} \tag{5.19}$$

et que la valeur moyenne de l'observable  $\hat{O}$  aura une croissance linéaire tel que :

$$\langle Q(t) | \hat{O} | Q(t) \rangle = \langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n e^{i(\omega_0 - \omega_n)t} |\langle n | \hat{O} | 0 \rangle|^2 - \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n e^{-i(\omega_0 - \omega_n)t} |\langle 0 | \hat{O} | n \rangle|^2 \tag{5.20}$$

La réponse du noyau est caractérisée par sa distribution de force définie comme :

$$S(E) = \lambda \sum_n \delta(E - E_n) |\langle 0 | \hat{O} | n \rangle|^2 \tag{5.21}$$

et dont les moments sont données par la relation suivante :

$$\begin{aligned}
m_k &= \int_0^\infty S(E) E^k dE \\
&= \lambda \sum_n E_n^k |\langle 0 | \hat{O} | n \rangle|^2
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Dans le cas d'une ISGMR, le moment d'ordre  $k = 0$  est donné par la valeur moyenne du rayon carré moyen du noyau multiplié par  $\lambda$ , c'est à dire  $m_0 = \lambda \langle Q(t) | \hat{r}^2 | Q(t) \rangle$ . L'amplitude de ce dernier devrait donc croître linéairement en fonction du paramètre  $\lambda$ .

### 5.4.3 Applications numériques.

L'ensemble des calculs numériques va être réalisé à l'aide de l'interaction de Skyrme SLy5. En effet nous avons montré dans le chapitre précédent que dans l'ajustement des paramètre de SLy5, la correction du centre de masse a été explicitement incluse, ce qui est adapté pour le cas de l'ISGMR, où le centre de masse est défini à tous les temps puisque  $\vec{r}_{\text{CM}} = \vec{0}$ . La première application numérique consiste à commencer par un cas simple, celui du noyau d'hélium 4. Le noyau est comprimé à l'aide d'un oscillateur harmonique afin d'explorer l'état excité correspondant à l'ISGMR. Ceci est réalisé en respectant la relation (5.16) où  $\hat{O} = \hat{r}^2$ . Pour ce faire, l'état initial du noyau est préparé à l'aide du modèle statique avec un Hamiltonien total du système incluant celui du noyau, plus celui du piège harmonique, caractérisé par la constante  $\lambda$ . Une fois initialisé, le calcul est réalisé à l'aide du modèle dynamique, où seul le Hamiltonien du noyau est pris en compte. Cette technique sera employée pour chacun des noyaux étudiés par la suite. La figure (5.7) montre l'évolution temporelle du moment monopolaire du noyau d'hélium 4, et ceci pour

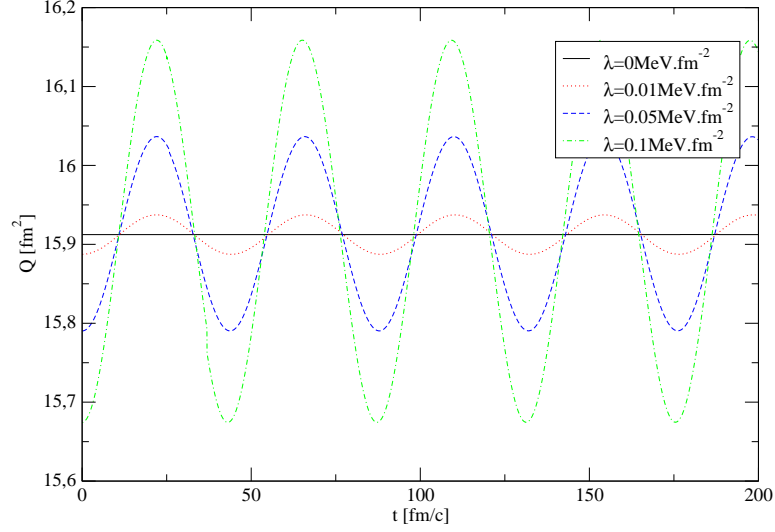


FIG. 5.7 – Evolution temporelle du moment monopolaire du noyau d'hélium 4 pour différentes valeurs du paramètre  $\lambda$ . On peut remarquer que les oscillations sont périodiques à une pulsation  $\omega_{He}$ , et que leurs amplitudes croient en fonction du paramètre  $\lambda$ .

différentes valeurs de la constante  $\lambda$ . On peut remarquer qu'il y a une parfaite oscillation du rayon carré moyen, c'est à dire une compression-dilatation périodique du noyau à la pulsation  $\omega_{He} = 28.33 \pm 0.05$  MeV, et ceci pour différentes valeurs de  $\lambda$ . Les figures (5.8) illustrent les variations des valeurs moyennes des différentes composantes du Hamiltonien. Nous pouvons observer qu'il y a un échange périodique à la pulsation  $\omega_{He}$  entre l'énergie cinétique, nucléaire, et Coulombienne.

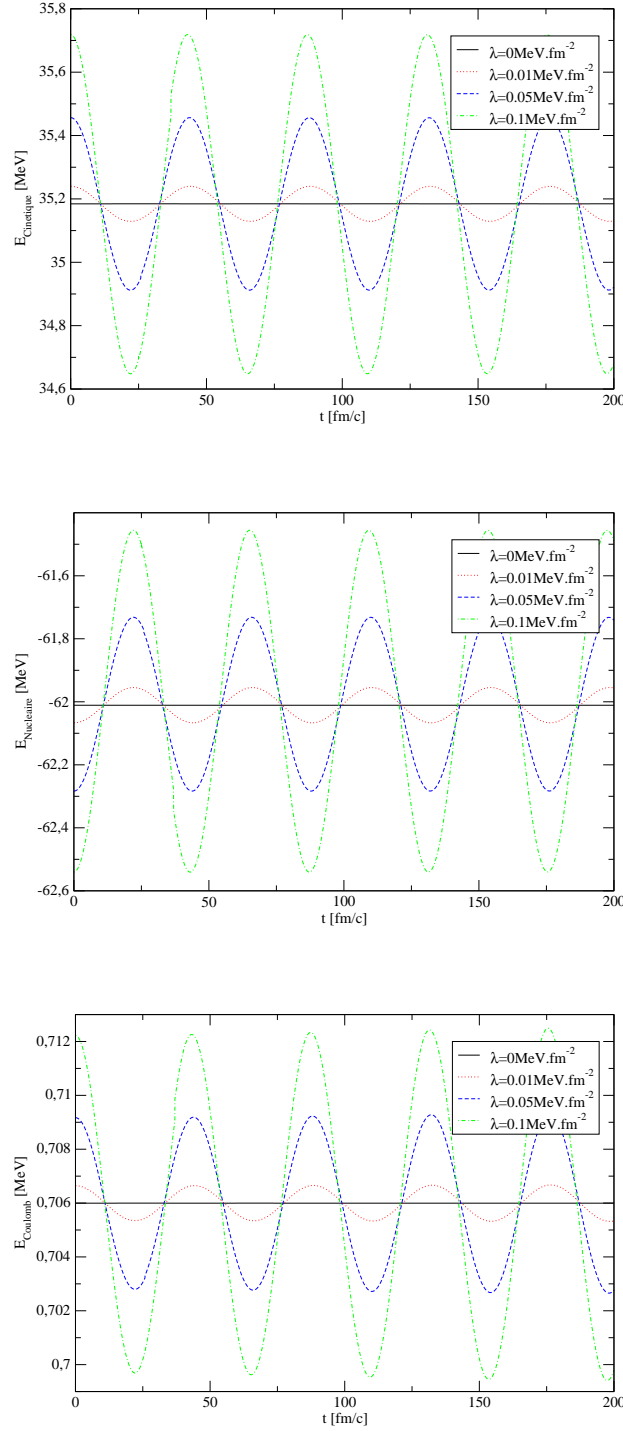


FIG. 5.8 – Evolution temporelle de l'énergie cinétique, nucléaire, et Coulombienne du noyaux d'hélium 4 pour différents paramètres  $\lambda$ . On remarque que les échanges s'effectuent à la pulsation propre du monopole  $\omega_{He} = 28.33 \pm 0.05$  MeV pour chacune des composantes, et que l'amplitude croit en fonction du paramètre  $\lambda$ .

La validité de nos résultats dans le cadre du régime linéaire est confirmée à l'aide des figures (5.9). Ces figures montrent respectivement l'énergie d'excitation totale, et l'amplitude du monopole  $\Delta R^2 = \text{Max}[\langle R(t)^2 \rangle_\lambda - \langle R(t)^2 \rangle_{\lambda=0}]$ . On peut voir que  $\Delta R^2$  et  $E^*$  croissent respectivement de manière linéaire et quadratique en  $\lambda$ .

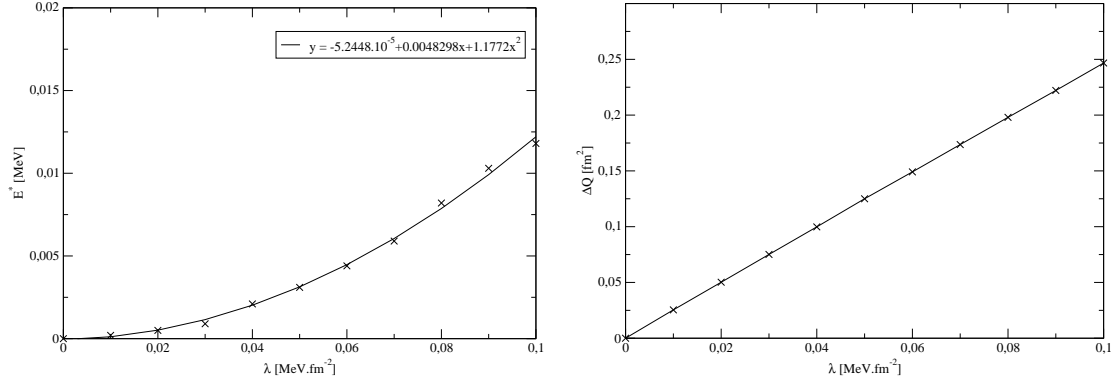


FIG. 5.9 – Evolution de l'énergie d'excitation (à gauche), et de l'amplitude du moment monopolaire (à droite) du noyau d'hélium 4 en fonction du paramètre  $\lambda$ , pour lesquelles nous avons respectivement une croissance quadratique et linéaire.

Dans la section précédente nous avons vu que l'état fondamental du noyau d'hélium 4 était une superposition de quatre gaussiennes dont les centroïdes étaient confondus avec le centre de masse. Cela reste vrai lors de l'évolution temporelle du monopole, où la position du centre de masse reste statique au cours du temps, comme l'ensemble des paramètres des gaussiennes. Seul les parties réelles des largeurs de gaussiennes données par la figure (5.10) évoluent dynamiquement à la pulsation  $\omega_{He}$ , ce qui caractérise la compression-dilatation du noyau. Ceci est une illustration de l'importance d'inclure la largeur des gaussiennes en tant que paramètre variationnel. Nous rappelons que la plus-part des calculs de structure nucléaire effectués avec des modèles de dynamique moléculaire sont obtenus dans le cadre de l'approximation AMD, pour laquelle la largeur est définie comme constante. On peut aussi remarquer de la figure (5.10), que l'effet de l'interaction Coulombienne est de produire une densité protonique plus étendue que la densité neutronique. Toutefois, cet effet ne dépasse pas 1%.

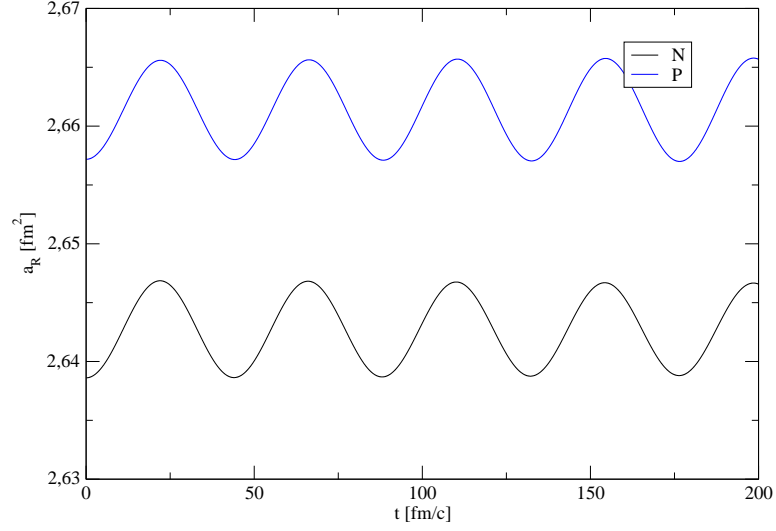


FIG. 5.10 – Evolution temporelle des parties réelles des largeurs des gaussiennes pour le noyau d'hélium 4 avec  $\lambda = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . Les courbes en noir et en bleu représentent respectivement la largeur associée aux neutrons, et aux protons. On peut remarquer que les oscillations sont périodiques à la pulsation  $\omega_{He} = 28.33 \pm 0.05 \text{ MeV}$ , et elles caractérisent la compression-dilatation du noyau.

Si l'on prend maintenant le cas du lithium 6, les figures (5.11) et (5.13) présentent la même phénoménologie que pour le noyau d'hélium 4. Néanmoins le spectre en Fourier du moment monopolaire donnée par la figure (5.12), nous montre que le système présente trois fréquences caractéristiques  $\omega_{Li1} = 19.73 \pm 0.29$  MeV,  $\omega_{Li2} = 25.14 \pm 0.47$  MeV, et  $\omega_{Li3} = 28.6 \pm 0.5$  MeV.

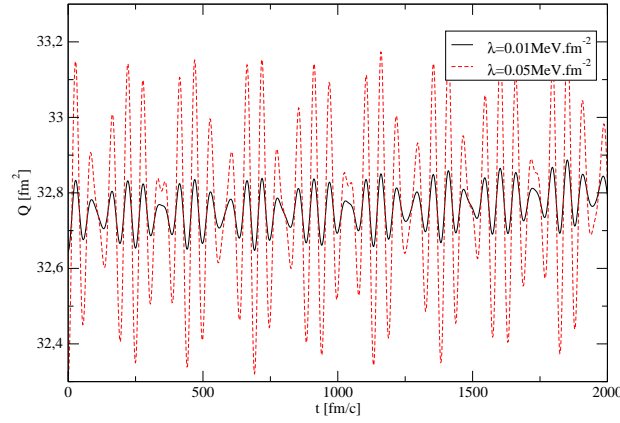


FIG. 5.11 – Evolution temporelle du moment monopolaire du noyau de lithium 6 pour différentes valeurs du paramètre  $\lambda$ . On peut remarquer que les oscillations sont périodiques à plusieurs pulsations propres du monopole, et que leurs amplitudes croient en fonction du paramètre  $\lambda$ .

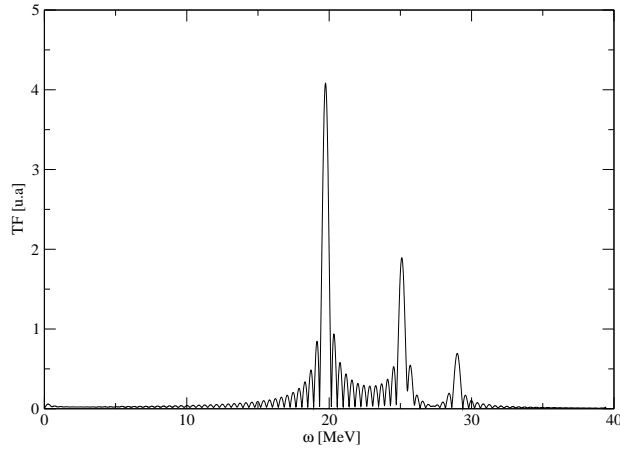


FIG. 5.12 – Transformée de Fourier du moment monopolaire du noyau de lithium 6. Nous trouvons trois pulsations caractéristiques du noyau à cause de sa déformation :  $\omega_{Li1} = 19.73 \pm 0.29$  MeV,  $\omega_{Li2} = 25.14 \pm 0.47$  MeV, et  $\omega_{Li3} = 28.6 \pm 0.5$  MeV.

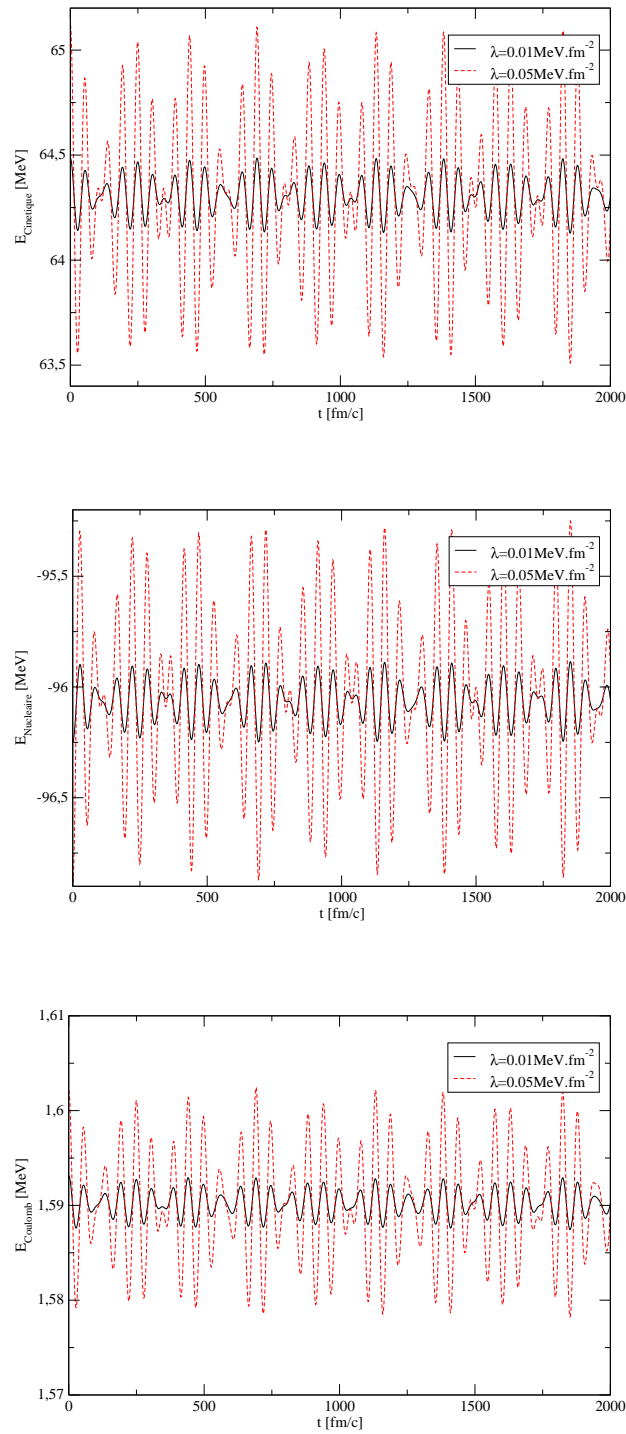


FIG. 5.13 – Evolution temporelle de l'énergie cinétique, nucléaire, et Coulombienne du noyaux de lithium 6 pour différents paramètres  $\lambda$ . On remarque que le comportement est périodique pour chacune des composantes, et plusieurs fréquences sont présentes.



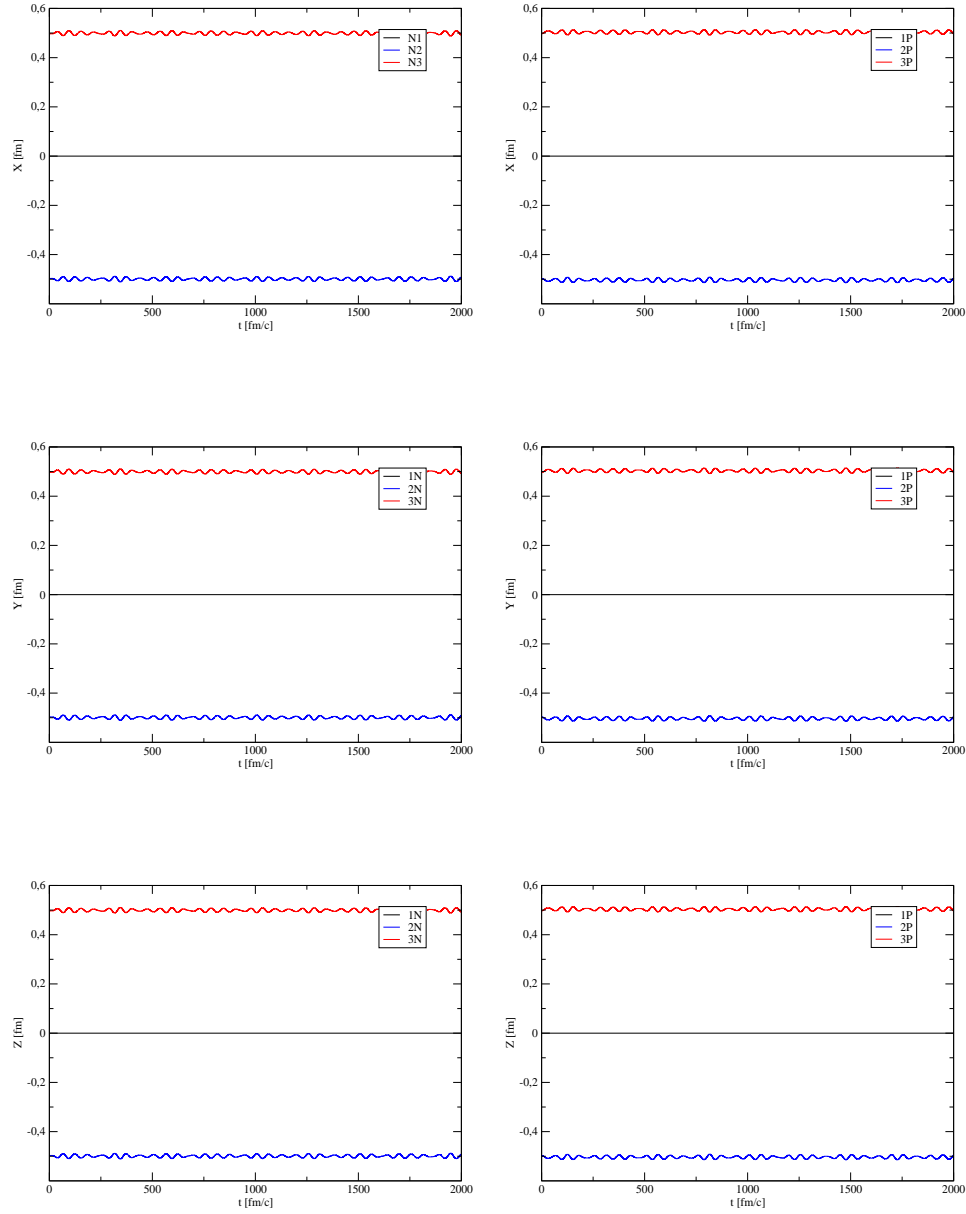


FIG. 5.14 – Evolution temporelle des positions des neutrons (colonne de gauche) et des protons (colonne de droite) pour le noyau de lithium 6 avec  $\lambda = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . On peut remarquer que seules les particules situées à la périphérie du centre de masse oscillent, et que les positions des deux particules situées au centre de masse ne varient pas.

Nous avons vu dans la section précédente que le lithium 6 était un noyau déformé, et cela explique pourquoi nous avons plusieurs fréquences caractéristiques. Les figures (5.15) illustrent l'évolution dynamique des parties réelles des largeurs des gaussiennes, qui dans tous les cas traduisent la compression-dilatation des gaussiennes pour les trois pulsations caractéristiques. Les figures (5.14) nous montrent que seuls les nucléons situés à la périphérie du noyau oscillent autour de leurs positions d'équilibre.

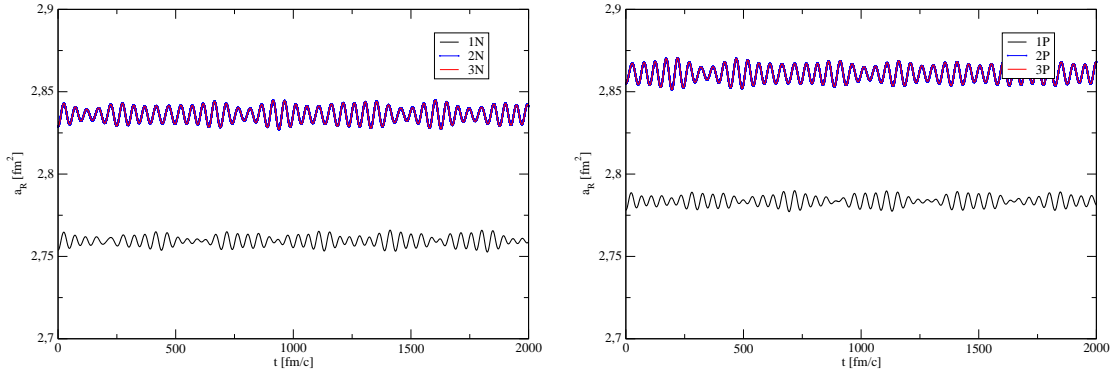


FIG. 5.15 – Evolution temporelle des parties réelles des largeurs des gaussiennes pour le noyau de lithium 6 pour  $\lambda = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . Les courbes à gauche et à droite représentent respectivement celles des neutrons, et des protons. On peut remarquer que les oscillations sont périodiques et qu'elles présentent plusieurs fréquences.

Un dernier calcul a également été réalisé pour le carbone 12. La figure ((5.16)) illustre l'évolution temporelle du monopole, pour lequel nous trouvons une pulsation caractéristique  $\omega_C = 24.017 \pm 0.02 \text{ MeV}$ . Les pulsations propres trouvées pour ces trois noyaux

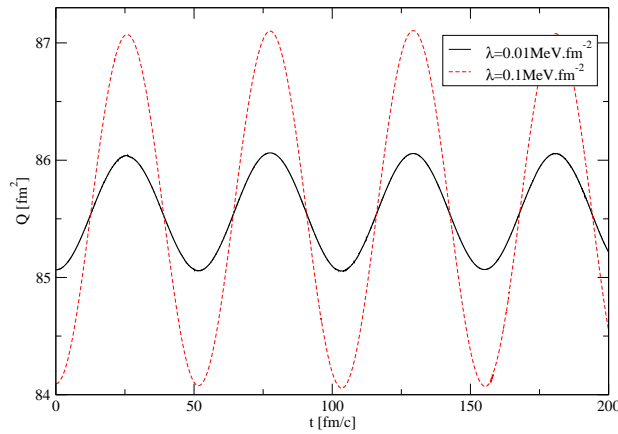


FIG. 5.16 – Evolution temporelle du moment monopolaire du noyau de carbone 12 pour différentes valeurs du paramètre  $\lambda$ . On peut remarquer que les oscillations sont périodiques à la pulsation  $\omega_C = 24.017 \pm 0.02 \text{ MeV}$ , et que leurs amplitudes croient en fonction du paramètre  $\lambda$ .

peuvent être comparé à la formule empirique  $\omega_e = 80A^{-1/3}$  [114, 122]. Nous obtenons à

l'aide de cette dernière des pulsations de monopole pour l'hélium 4, le lithium 6, et le carbone 12 qui sont respectivement données par  $\omega_{He}^e = 50.397 \text{ MeV}$ ,  $\omega_{Li}^e = 44.0257 \text{ MeV}$ , et  $\omega_C^e = 34.95 \text{ MeV}$ . La différence entre les valeurs trouvées par le modèle FMD, et les valeurs de la formule empirique peuvent qualitativement s'expliquer par le fait que la validité de la formule empirique est établie seulement pour  $A \geq 90$ . Expérimentalement les vibrations monopolaires des noyaux d'hélium 4 et de lithium 6 n'ont jamais pu être mesurées. En ce qui concerne le carbone 12, D.H. Youngblood *et al.* ont déterminé expérimentalement l'énergie de vibration à  $\omega_C = 21.9 \pm 0.3 \text{ MeV}$  [123, 124], ce qui est proche de la valeur trouvée à l'aide du modèle FMD. Cette observation est très encourageante en ce qui concerne la prédictivité de FMD pour les mouvements collectifs des noyaux. Si l'on cherche à faire des calculs pour des noyaux dont les masses vont au delà du carbone 12, le modèle FMD semble très instable numériquement, et il est quasiment impossible de réaliser des calculs d'ISGMR. En effet lors de la phase de compression, les particules tendent à être très proches les unes des autres, et la conséquence directe est que les éléments de la matrice de recouvrement  $O^{-1}$  sont proches, ce qui induit un déterminant de la matrice  $O^{-1}$  proche de zéro. Etant donné que l'estimation de  $O$  est nécessaire dans la résolution des équations de mouvement, cela explique pourquoi nous avons tant d'instabilités numériques pour les calculs des noyaux plus lourds. Le cas du noyau d'oxygène 16 est représenté par la figure (5.17), où l'on observe la convergence vers zéro des déterminants des matrices de recouvrement lors de la phase de compression. Le modèle FMD n'est donc pas adapté aux calculs des ISGMR, et plus généralement à la description de la matière à des densités plus importantes que la densité de saturation. Nous nous attendons toutefois à ce que ce type de problème n'apparaîtra pas dans le calcul de modes collectifs qui n'impliquent pas de compression, ni dans la description de la matière d'étoile qui concerne des densités inférieures à la densité de saturation.

## 5.5 Conclusion.

En résumé nous avons calculé les états fondamentaux de noyaux bien connus. Nos résultats sont dans l'ensemble en très bon accord avec Hartree-Fock. Les deux modèles donnent des résultats proches des résultats expérimentaux. Ce qui semble confirmer de nouveau la bonne réalisation numérique de notre modèle. Nous avons également vu que le calcul d'ISGMR à l'aide du modèle FMD est très encourageant en ce qui concerne sa prédictivité pour les mouvements collectifs des noyaux. Néanmoins il faudra veiller à l'utiliser dans la description des mouvements collectifs n'impliquant pas de compression. Le calcul de résonance géante dipolaire électrique isovectorielle (IVGDR) est l'une des futures perspectives que nous envisageons de réaliser. L'IVGDR est un mode collectif interprété comme une vibration des protons et des neutrons en opposition de phase, séparant le centre de masse du noyau de son centre de charge et créant ainsi un moment dipolaire électrique. Des calculs préliminaires à l'aide d'un modèle FMD simplifié ont été réalisés pour le cas des IVGDR, et ils semblent donner des résultats encourageants [125].

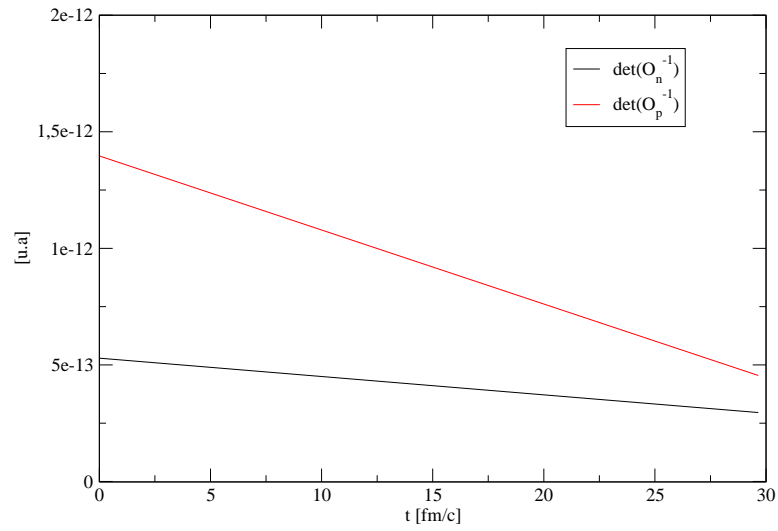


FIG. 5.17 – Evolution temporelle des déterminants des matrices de recouvrement lors de la phase de compression d'un noyau d'oxygène 16 pour  $\lambda = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . Le déterminant de la matrice de recouvrement entre les neutrons (trait noir) est légèrement inférieur à celui de la matrice de recouvrement entre les protons (trait rouge). Ceci s'explique par le fait que les protons sont moins comprimés par rapport aux neutrons à cause de l'interaction Coulombienne.



# Chapitre 6

## Thermodynamique des systèmes nucléaires finis à l'aide du modèle FMD.

### 6.1 Introduction.

Notre modèle FMD construit à l'aide du formalisme Skyrme Hartree-Fock étant bien établi et validé à l'aide des nombreux précédent tests, tels que ceux que l'on a pu réaliser pour des calculs de structure nucléaire, nous allons maintenant établir ses propriétés thermodynamiques. Notre motivation principale est d'extraire les caractéristiques thermodynamiques des écorces des proto-étoiles, et étoiles à neutrons. Néanmoins au cours de ce chapitre nous nous contenterons de commencer par des cas simples, et d'exposer une méthode permettant d'extraire certaines de ces données dans le cadre de systèmes finis, tel que les noyaux atomiques. En effet, les systèmes finis demandent un effort numérique beaucoup moins important, et il n'y a aucune ambiguïté sur les conditions aux bords. Dans un modèle semblable au notre, Schnack *et al.* [74] ont évalué la thermodynamique d'un noyau fini et ils ont observé une transition de phase. Il est donc intéressant de reproduire ces mêmes résultats. On pourra également tester l'influence des différentes forces sur le diagramme des phases, chose qui n'a pas été faite dans la référence [74].

La température des systèmes de fermions en interaction lorsqu'ils se trouvent dans des états excités est l'une des données thermodynamique les plus difficiles à extraire. Elle est d'autant plus importante car elle constitue l'une des pièces maîtresses contribuant à l'extraction du diagramme des phases. De telles études ont déjà été réalisées à l'aide de modèle de dynamiques moléculaires, et ils ont permis l'extraction de la courbe calorique de systèmes finis. De nombreuses méthodes ont été proposées, et l'une des plus populaires est la méthode de Nosé-Hoover [126, 127, 128, 129, 130] qui consiste à travailler dans l'ensemble canonique. Le principe de base est de générer des coordonnées virtuelles avec des équations d'évolutions couplées aux équations de mouvements des particules, et ceci dans le but de fixer la température du système. Néanmoins nous n'utiliserons pas cette méthode, car il a été démontré que dans certains cas spécifiques [131, 132, 133], il est impossible d'obtenir un système ergodique. M. Ison *et al.* ont en particulier démontré dans le cadre de la mécanique classique, qu'il était beaucoup plus facile d'évaluer la thermodynamique des systèmes microcanoniques, que celle des systèmes canoniques. En effet un système qui est ergodique et isolé, peut ne pas se thermaliser en contact d'un thermostat, à cause du

développement de mouvements collectifs de grande amplitude. Le cas de particules plongées dans un oscillateur harmonique est l'un des ces exemples. Un piège harmonique est souvent utilisé pour localiser l'ensemble des particules dans un volume fini. En effet si l'on cherche à étudier un système fini isolé tel un noyau atomique, les boîtes n'existent pas, et l'ensemble où le volume est constant n'est pas physique. Par contre ce qui est physique est la taille des systèmes vue comme une observable, c'est à dire la valeur moyenne du rayon carrée moyen. Imposer une telle contrainte est exactement équivalent à introduire un potentiel harmonique, et c'est seulement dans cet ensemble que la transition se verra par un plateau, voir par un "backbending" dans la courbe calorique [74, 41]. Nous comptons exactement imposer ce type de contrainte pour le cas des noyaux atomiques, et cela explique pourquoi nous n'utiliserons pas la méthode de Nosé-Hoover. Une alternative possible est de travailler dans l'ensemble microcanonique, où l'on va mettre faiblement en contact notre système avec un thermomètre. Lorsque l'ensemble sera en équilibre thermodynamique, on va pouvoir en extraire la température de notre système à l'aide de ce dernier. La précédente étude sur la thermodynamique des systèmes finis à l'aide du modèle FMD utilise effectivement cette méthode [74]. Nous exposerons dans un premier temps le principe de la méthode permettant l'implémentation du thermomètre, et nous proposerons une procédure systématique plus complète par rapport à celles qui ont déjà été présentées dans la littérature. Enfin nous finirons ce chapitre en extrayant les courbes caloriques d'un noyau d'hélium 4, et ceci pour différentes fonctionnelles de Skyrme afin de tester leur influence sur la thermodynamique du système. Nous examinerons également les effets de l'interaction coulombienne sur la courbe calorique de ce noyau.

## 6.2 Ensemble statistique et choix du thermomètre nucléaire.

### 6.2.1 Principe de base.

Lorsque l'on décrit la dynamique d'un système de fermions libres ou en interaction, ce dernier se situe au dessus du niveau fondamental, et l'on est donc en présence d'états excités. La dynamique du système est Hamiltonienne, l'énergie totale est conservée au cours du temps, et le système explore différents états excités qui ont la propriété de correspondre tous à la même énergie, définie par la condition initiale. Si le système est ergodique, il passera un temps égal dans chacun de ces états. Pour l'instant nous faisons cette hypothèse que nous vérifierons par la suite, car en générale les systèmes complexes en interaction sont ergodiques, tout au moins au niveau classique. Dans le cadre de cette hypothèse, la moyenne ergodique d'une observable quelconque  $\hat{\mathcal{A}}$  sera donnée par :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A} \rangle_o &= \text{Tr}(\hat{D}_o \hat{\mathcal{A}}) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{A}(t) dt \end{aligned} \quad (6.1)$$

avec

$$\mathcal{A}(t) = \langle Q(t) | \hat{\mathcal{A}} | Q(t) \rangle \quad (6.2)$$

et

$$\hat{D}_o = \sum_i |\Psi_i\rangle P_i \langle \Psi_i| \quad (6.3)$$

où la somme est réalisée sur l'ensemble des états à énergie  $E$ , et ayant la probabilité  $P_i = 1/W(E)$  où  $W(E)$  est le nombre d'états à énergie  $E$ . Dans ce sens, nous pouvons dire que notre système est "chaud", car suivre sa dynamique dans le temps est équivalent à échantillonner sa fonction de partition dans l'ensemble microcanonique. Il est donc caractérisé par une température, qui est la température microcanonique  $T^{-1} = \partial \log(W)/\partial E$ , que nous nous proposons de déterminer afin de décrire le diagramme de phase. L'un des moyens possibles est d'utiliser le fluide nucléaire comme un bain thermique, et de le mettre en contact thermodynamique avec un thermomètre nucléaire dont nous devons connaître analytiquement la densité des états. Nous travaillerons dans un ensemble microcanonique où l'on va fixer l'énergie du système total, qui sera constitué du système nucléaire, ainsi que celle du thermomètre. Par définition de thermomètre, la température mesurée à l'équilibre thermique pourra être identifiée avec la température du noyau isolé. Une autre possibilité est de mettre en contact le fluide nucléaire avec un bain thermique pour lequel on connaît exactement la température. Dans ce cas on obtiendra alors la température canonique du noyau. La fonction d'onde totale du système sera un produit tensoriel entre la fonction d'onde du fluide nucléaire, et celle du thermomètre ou du bain thermique selon le cas considéré :

$$|\Psi_{\text{Total}}\rangle = |\Psi_{\text{Nucéaire}}\rangle \otimes |\Psi_{\text{Th}}\rangle \quad (6.4)$$

Le Hamiltonien total du système sera défini comme une somme du Hamiltonien du système nucléaire, du Hamiltonien du thermomètre (ou du bain thermique), et du Hamiltonien d'interaction qui permet le contact thermodynamique entre les deux systèmes :

$$\hat{H}_{\text{Total}} = \hat{H}_{\text{Nucéaire}} + \hat{H}_{\text{Th}} + \hat{H}_{\text{I}} \quad (6.5)$$

Si les valeurs moyennes respectent la condition suivante :

$$\mathcal{H}_{\text{Nucéaire}} \gg \mathcal{H}_{\text{Th}} \quad (6.6)$$

le système nucléaire sera alors mis en contact avec un thermomètre, et l'on travaillera ainsi dans l'ensemble micro-canonique. Si l'on souhaite travailler dans l'ensemble canonique, c'est à dire lorsque le système nucléaire sera mis en contact avec un bain thermique, on devra alors vérifier la condition :

$$\mathcal{H}_{\text{Th}} \gg \mathcal{H}_{\text{Nucéaire}} \quad (6.7)$$

Le Hamiltonien du système nucléaire sera constitué comme d'habitude d'une partie cinétique et d'une partie liée à l'interaction. Néanmoins il faudra lui rajouter un terme de piégeage qui va permettre de confiner les deux systèmes en contact, de telle sorte à ce qu'ils interagissent constamment, et que le système nucléaire associé à un volume fini même en présence d'états dans le continuum. Le Hamiltonien total pour le système nucléaire sera défini par :

$$\hat{H}_{\text{Nucéaire}} = \hat{H}_{\text{Cinétique}} + \hat{H}_{\text{Interaction}} + \hat{H}_{\text{Trap}} \quad (6.8)$$

Concernant la partie liée au piège, on choisira dans un premier temps un puit harmonique. On utilise effectivement des pièges harmoniques dans les expériences de physique atomique, et un tel piège est équivalent à imposer un rayon carré moyen défini au système. Le Hamiltonien du piège est donnée par :

$$\hat{H}_{\text{Trap}} = W_2 \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 \quad (6.9)$$



avec  $W_2$  la constante du piège jouant le rôle d'une contrainte extérieure que l'on impose sur le système nucléaire. L'introduction de ce terme est qualitativement équivalente à calculer la thermodynamique dans l'ensemble isobare.  $W_2$  et  $\vec{r}^2$  peuvent être respectivement considérés comme une pression surfacique extérieure, et une surface. La valeur moyenne du Hamiltonien du système nucléaire joue donc le même rôle que l'enthalpie. En effet on retrouve exactement l'enthalpie si on impose un piège cubique :

$$\hat{H}_{\text{Trap}} = W_3 \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^3 \quad (6.10)$$

Nous discuterons par la suite le Hamiltonien du thermomètre (ou du bain thermique), et nous verrons qu'ils existent plusieurs choix possibles. La valeur moyenne du Hamiltonien qui couple les deux systèmes devra être choisi comme une perturbation devant la valeur moyenne de l'énergie du système nucléaire, et devant celle du thermomètre (ou du bain thermique) tel que :

$$\mathcal{H}_{\text{Nucéaire}} \gg \mathcal{H}_I \text{ et } \mathcal{H}_{\text{Th}} \gg \mathcal{H}_I \quad (6.11)$$

On pourra ainsi considérer en première approximation, que les deux systèmes sont indépendants en accord avec l'hypothèse (6.4), lorsque l'on cherchera à calculer la moyenne temporelle de leurs énergies respectives.

Lorsqu'il y a contact thermodynamique, les deux systèmes échangent de l'énergie. L'hypothèse d'ergodicité pour le système total, implique que les moyennes temporelles donnent accès aux propriétés statiques du système, seulement dans la limite où  $T \rightarrow \infty$ . Ceci signifie qu'il y aura d'abord une phase transitoire de thermalisation avant d'atteindre l'équilibre thermodynamique. La durée du régime transitoire pourra être estimée en demandant qu'il y ait une convergence de l'énergie moyenne du fluide nucléaire, et de celle du thermomètre. Une fois la thermalisation atteinte, on pourra déterminer la moyenne ergodique de chaque composante d'énergie. La première nous donnera l'énergie d'excitation du système nucléaire, et la seconde sa température. En effet à l'équilibre le noyau et le thermomètre (ou bain thermique) sont caractérisés par la même température  $T = T_{\text{Nucéaire}} = T_{\text{Th}}$ , et pour thermomètre (ou bain thermique) on devra choisir un système dont on connaît analytiquement la relation fonctionnelle entre température et énergie :

$$< \mathcal{H}_{\text{Th}} >_o = f(T) \quad (6.12)$$

La température pour une énergie d'excitation donnée du fluide nucléaire sera finalement donnée en inversant l'équation (6.12) :

$$T = f^{-1}(< \mathcal{H}_{\text{Th}} >_o) \quad (6.13)$$

Après avoir défini le principe de notre méthode permettant d'obtenir la température d'un système isolé à l'équilibre, nous allons maintenant nous concentrer sur le choix du thermomètre permettant de réaliser cette étude.

### 6.2.2 Cas du système à deux niveaux : le spin $\frac{1}{2}$ .

Le spin  $\frac{1}{2}$  connu aussi sous le nom de système à deux niveaux, peut être choisi comme thermomètre de référence. Le Hamiltonien du thermomètre dans ce cas est donné par :

$$\hat{H}_{\text{Th}} = \hbar\omega\hat{\sigma}_z \quad (6.14)$$

où  $\sigma_z$  est l'une des trois matrices de Pauli. On peut choisir ce système comme thermomètre car l'on peut connaître analytiquement ses propriétés thermiques dans l'ensemble canonique. En effet deux seules orientations "up" et "down" existent, respectivement caractérisées par les états propres  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ , et par les énergies propres  $E_{\pm} = \pm\hbar\omega$ . L'équation d'état donnant l'énergie en fonction de sa température s'écrit dans l'ensemble canonique :

$$\begin{aligned} \langle \hbar\omega\hat{\sigma}_z \rangle_0 &= \frac{\sum_{i=\pm} E_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=\pm} e^{-\beta E_i}} \\ &= -\hbar\omega \frac{e^{+\beta\hbar\omega} - e^{-\beta\hbar\omega}}{e^{+\beta\hbar\omega} + e^{-\beta\hbar\omega}} \\ &= -\hbar\omega \tanh(\beta\hbar\omega) \end{aligned} \quad (6.15)$$

Cette relation peut être inversée de tel sorte à obtenir la température, en fonction de l'orientation moyenne du spin à l'équilibre tel que :

$$T = \frac{2\hbar\omega}{\ln\left(\frac{1-\langle\hat{\sigma}_z\rangle_0}{1+\langle\hat{\sigma}_z\rangle_0}\right)} \quad (6.16)$$

Cette expression sera correcte dans la limite dans laquelle le système nucléaire peut être considéré comme un bain thermique pour le spin. Ceci est vrai si le nombre de degrés de liberté du système nucléaire est  $N_{dof} \gg 2$ , et les énergie en jeu  $\mathcal{H}_{\text{Nucéaire}} \gg \mathcal{H}_{\text{Th}}$ . En ce qui concerne le couplage du thermomètre avec le fluide nucléaire, il faut un opérateur qui dépend à la fois d'observables du noyau, et du thermomètre. Dans l'espace du thermomètre, il faut un opérateur qui permet des transitions entre les différents états d'énergie, c'est à dire avec les différentes orientations, et qui ne commute pas avec  $\hat{\sigma}_z$ . Dans l'espace du noyau, il faut une observable collective. Il a été démontré [134, 135, 136, 137] qu'une interaction du type :

$$\hat{H}_I = \hat{R} \otimes \hat{S} \quad (6.17)$$

où  $\hat{R}$  est un opérateur dans l'espace du réservoir, c'est à dire du noyau et  $\hat{S}$  un opérateur dans l'espace du thermomètre, conduit à une distribution asymptotique des états du thermomètre qui respecte l'équilibre canonique  $\hat{D} = \exp(-\beta\hat{H})/Z$ . On pose donc :

$$\hat{H}_I = \lambda\hat{\sigma}_y \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 \quad (6.18)$$

en choisissant le couplage  $\lambda$  pour que la valeur moyenne respecte toujours les conditions données par l'équation (6.11). En utilisant les règles de commutations des matrices de Pauli :

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (6.19)$$

où  $\epsilon_{ijk}$  est le tenseur de Levi-Cevita, on peut déterminer les équations d'évolution de chacune des composantes du spin à l'aide du théorème d'Herenfest. Nous obtenons pour

les trois composantes du spin les trois équations différentielles suivantes :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d \langle \hat{\sigma}_x \rangle}{dt} &= \langle [\hat{H}_{\text{Total}}, \hat{\sigma}_x] \rangle \\
 &= \hbar\omega \langle [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] \rangle + \lambda \langle \hat{r}^2 \rangle \langle [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_x] \rangle \\
 &= 2i \left[ \hbar\omega \langle \hat{\sigma}_y \rangle - \lambda \langle \hat{r}^2 \rangle \langle \hat{\sigma}_z \rangle \right]
 \end{aligned} \tag{6.20}$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d \langle \hat{\sigma}_y \rangle}{dt} &= \langle [\hat{H}_{\text{Total}}, \hat{\sigma}_y] \rangle \\
 &= \hbar\omega \langle [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_y] \rangle \\
 &= -2i\hbar\omega \langle \hat{\sigma}_x \rangle
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d \langle \hat{\sigma}_z \rangle}{dt} &= \langle [\hat{H}_{\text{Total}}, \hat{\sigma}_z] \rangle \\
 &= \lambda \langle \hat{r}^2 \rangle \langle [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] \rangle \\
 &= 2i\lambda \langle \hat{r}^2 \rangle \langle \hat{\sigma}_x \rangle
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

Nous pouvons remarquer qu'elles sont couplées entre elles, ainsi qu'avec le fluide nucléaire par l'intermédiaire du Hamiltonien de couplage. Leurs résolutions s'effectueront à l'aide de la même méthode d'intégration que celle utilisée pour le modèle FMD, c'est à dire à l'aide d'une méthode de prédictor-correcteur initialisé à l'aide d'une méthode de Runge et Kutta à l'ordre 4. L'un des tests permettant de vérifier la bonne résolution numérique de ces équations, est que l'on devra toujours garder la norme du spin étant égale à un, c'est à dire à toujours respecter la condition suivante :

$$\langle \hat{\sigma}^2 \rangle = \langle \vec{\sigma}_x^2 \rangle + \langle \vec{\sigma}_y^2 \rangle + \langle \vec{\sigma}_z^2 \rangle = 1 \tag{6.23}$$

Cette condition est très précisément vérifiée dans les résultats que nous montrerons par la suite. Avant d'extraire la courbe calorique d'un système fini, pour lequel nous voulons connaître la relation fonctionnelle température-énergie dans un domaine énergétique couvrant à la fois, la phase liée ("liquide") et non liée ("gaz"), nous allons explorer dans la section suivante le choix d'un oscillateur harmonique comme thermomètre. Ce choix a été celui de Schnack *et al.* [74], lorsqu'ils ont voulu extraire la courbe calorique de systèmes finis.

### 6.2.3 Cas de l'oscillateur harmonique.

Comme pour le spin  $\frac{1}{2}$ , l'oscillateur harmonique est l'un des systèmes dont on connaît analytiquement les propriétés thermodynamiques. Il peut donc être utilisé comme thermomètre nucléaire. On considérera un oscillateur harmonique quantique à trois dimensions dont le Hamiltonien est donnée par :

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\text{Th}} &= \hat{H}_{\text{HO}} \\
 &= \frac{\hat{p}_{\text{th}}^2}{2m_{\text{th}}} + \frac{1}{2}m_{\text{th}}\omega_{\text{th}}\hat{r}_{\text{th}}^2
 \end{aligned} \tag{6.24}$$

et qui admet pour énergie moyenne :

$$E_{\text{HO}} = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \tag{6.25}$$

où les  $n_i$  représentent les nombres quantiques d'excitation. Les équations de mouvement du thermomètre correspondent donc aux équations de mouvement du modèle FMD pour une particule libre, plongée dans un puit harmonique. La fonction de partition est donnée par :

$$\begin{aligned}
 Z_{\text{HO}} &= e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_2} \sum_{n_3=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_3} \\
 &= e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega} \left( \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \right)^3 \\
 &= \left( \frac{2}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \right)^3
 \end{aligned} \tag{6.26}$$

on peut ensuite en déduire la moyenne statistique de son énergie dans l'ensemble canonique :

$$\begin{aligned}
 \langle E_{\text{HO}} \rangle_o &= -\frac{\partial \ln(Z_{\text{HO}})}{\partial \beta} \\
 &= \frac{3\hbar\omega}{2} \frac{1}{\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

ainsi que l'expression de la température du thermomètre en fonction de cette dernière quantité :

$$T = \frac{\hbar\omega}{\ln\left(\frac{\langle E_{\text{HO}} \rangle_o + \frac{3}{2}\hbar\omega}{\langle E_{\text{HO}} \rangle_o - \frac{3}{2}\hbar\omega}\right)} \tag{6.28}$$

En suivant les mêmes arguments qu'au paragraphe (6.2.2), le couplage entre le fluide nucléaire et le thermomètre peut être choisi par :

$$\hat{H}_I = \lambda \hat{r}_{\text{th}}^2 \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 \tag{6.29}$$

où  $\lambda$  sera imposé de telle sorte à toujours respecter les relations de l'équations (6.11). A première vue le choix du spin 1/2 ou d'un oscillateur harmonique en tant que thermomètre semble largement arbitraire. Nous allons voir toutefois montrer dans la section suivante, qu'il existe une connexion entre ces deux choix de thermomètre à l'aide de la transformation de Holstein-Primakoff [138].

#### 6.2.4 Connexion entre un spin J et l'oscillateur harmonique.

Au cours de cette sous-partie, nous allons faire la connexion entre un spin J, et un oscillateur harmonique. La transformation de Holstein-Primakoff démontrée dans la référence [138] donne la relation existant entre les opérateurs de création  $\hat{a}^\dagger$  et d'annihilation  $\hat{a}$  de phonon pour un oscillateur harmonique, avec les opérateurs  $\hat{J}^+$  et  $\hat{J}^-$  d'un spin J par les relations :

$$\begin{aligned}
 \hat{J}^+ &= \sqrt{2J} \hat{a}^\dagger f(J) \\
 \hat{J}^- &= \sqrt{2J} f(J) \hat{a} \\
 \hat{J}_z &= \hat{a}^\dagger \hat{a} - J
 \end{aligned} \tag{6.30}$$

où l'on rappelle que les opérateurs  $\hat{J}^+$  et  $\hat{J}^-$  sont reliés aux composantes de spin selon les axes x et y par :

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x &= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^+ + \hat{\sigma}^-) \\ \hat{\sigma}_y &= \frac{i}{2}(\hat{\sigma}^- - \hat{\sigma}^+)\end{aligned}\quad (6.31)$$

$f(J)$  est une fonction que l'on peut exprimer à l'aide des opérateurs  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$  comme :

$$f(J) = \sqrt{1 - \frac{\hat{a}^\dagger \hat{a}}{2J}} \simeq 1 \quad \text{si } J \rightarrow \infty \quad (6.32)$$

Dans la limite  $J \rightarrow \infty$ , il en découle que les relations définies dans l'équation (6.30) se simplifient par :

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x &= \sqrt{\frac{J}{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \hat{\sigma}_y &= i\sqrt{\frac{J}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \\ \hat{\sigma}_z &= \hat{a}^\dagger \hat{a} - J\end{aligned}\quad (6.33)$$

et sachant que les opérateurs  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$  peuvent être reliés aux opérateurs position et impulsion par :

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\end{aligned}\quad (6.34)$$

on en déduit une proportionnalité entre ces opérateurs et les composantes du spin dans la limite des J très grands où :

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x &= \sqrt{\frac{Jm\omega}{\hbar}}\hat{x} \\ \hat{\sigma}_y &= -\sqrt{\frac{J}{m\hbar\omega}}\hat{p} \\ \hat{\sigma}_z &= \frac{1}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} - 1\right) - J\end{aligned}\quad (6.35)$$

Ainsi on peut réécrire le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique sous forme d'un Hamiltonien de spin :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{HO}} &= \frac{\hat{p}_{\text{th}}^2}{2m_{\text{th}}} + \frac{1}{2}m_{\text{th}}\omega_{\text{th}}\hat{x}_{\text{th}}^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}_{\text{th}}^2 + \frac{\hat{p}_{\text{th}}^2}{m\hbar\omega}\right) \\ &= \lim_{J \rightarrow \infty} \hbar\omega \left(\hat{J}_z + (2J + 1)\right)\end{aligned}\quad (6.36)$$

et l'on peut remarquer que le Hamiltonien du spin  $J$  est à une constante près, parfaitement équivalent à celui d'un oscillateur harmonique. On peut également faire la même connexion avec le Hamiltonien de couplage (6.18) pour le thermomètre de spin, et l'on trouve :

$$\hat{H}_1 = -\lambda \sqrt{\frac{J}{m\hbar\omega}} \hat{p}_{\text{th}} \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 \quad (6.37)$$

Dans l'expression précédente, on aurait pu obtenir l'opérateur position à la place de l'opérateur impulsion en remplaçant l'opérateur  $\hat{\sigma}_y$  par l'opérateur  $\hat{\sigma}_x$ . Néanmoins la phénoménologie est tout à fait identique, car cela est équivalent à permuter les axes  $x$  et  $y$  du spin. Il existe donc une équivalence exacte entre les Hamiltoniens  $\hat{H}_{\text{HO}}$ , et  $\lim_{J \rightarrow \infty} \hbar\omega \hat{J}_z$ . En particulier le spectre en énergie à la même forme, et les niveaux d'énergie sont équidistants. Il est cependant infini pour l'oscillateur harmonique, et limité à  $-\hbar\omega J \leq E \leq \hbar\omega J$  pour le spin. La seule différence qui existe entre les deux types de thermomètre présentés plus haut, est donc donnée par la dimension du spectre, et par le fait que l'oscillateur harmonique utilisé pour les calculs est un oscillateur à trois dimensions. On s'attend donc à ce que les deux thermomètres aient les mêmes caractéristiques. Nous allons maintenant passer à la sous-partie liée aux applications numériques.

### 6.2.5 Résultats numériques.

#### Résultats pour le spin $\frac{1}{2}$ .

Nous commencerons tout d'abord à tester le formalisme posé ci-dessus en utilisant comme thermomètre le spin  $\frac{1}{2}$ . On prendra comme fluide nucléaire, un noyau d'Hélium 4 qui est le système le plus simple pouvant explorer tous les états de spin et d'isospin, et on utilisera pour tous nos calculs l'interaction de Skyrme de type SLy4d. En effet nous nous attendons à ce que à haute énergie d'excitation le système puisse se fragmenter et ne présenter plus un seul centre de masse, hypothèse qui est explicitement utilisée pour la détermination des paramètres de SLy4. Le noyau sera initialisé dans un état suffisamment excité, de tel sorte à ce qu'il puisse échanger de l'énergie avec le thermomètre. L'ensemble des figures (6.1) a été obtenu en prenant comme valeurs pour la constante de puits et la fréquence du spin à  $W_2 = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$  et  $\hbar\omega = 20 \text{ MeV}$ . La constante d'interaction entre les deux systèmes a été imposée à  $\lambda = 0.02 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . On peut vérifier dans un premier temps à l'aide des figures (6.1), que les conditions régies par les relations (6.11) et (6.23) sont parfaitement respectées. Les figures (6.1) illustrent l'évolution énergétique pour le fluide nucléaire ainsi que celle du thermomètre, où l'on a initialisé ce dernier de manière arbitraire. On peut remarquer que les deux systèmes restent bloqués autour d'une même valeur moyenne, et qu'il apparaît un phénomène de battement pas compatible avec l'image d'une exploration ergodique de l'espace de phases. Il en est de même si l'on change leurs énergies initiales respectives. Etant donné que notre formalisme ne fonctionne pas dans la pratique, il est difficile d'être convaincu que les valeurs utilisées pour  $W_2$ ,  $\hbar\omega$ , et  $\lambda$  ont été choisies de façon judicieuse. Néanmoins des résultats semblables ont été obtenus pour n'importe quel autres choix concernant ces constantes. Ceci montre que le problème n'est pas lié à un temps de thermalisation qui serait trop long, mais qu'il s'agit d'un problème plus conceptuel.

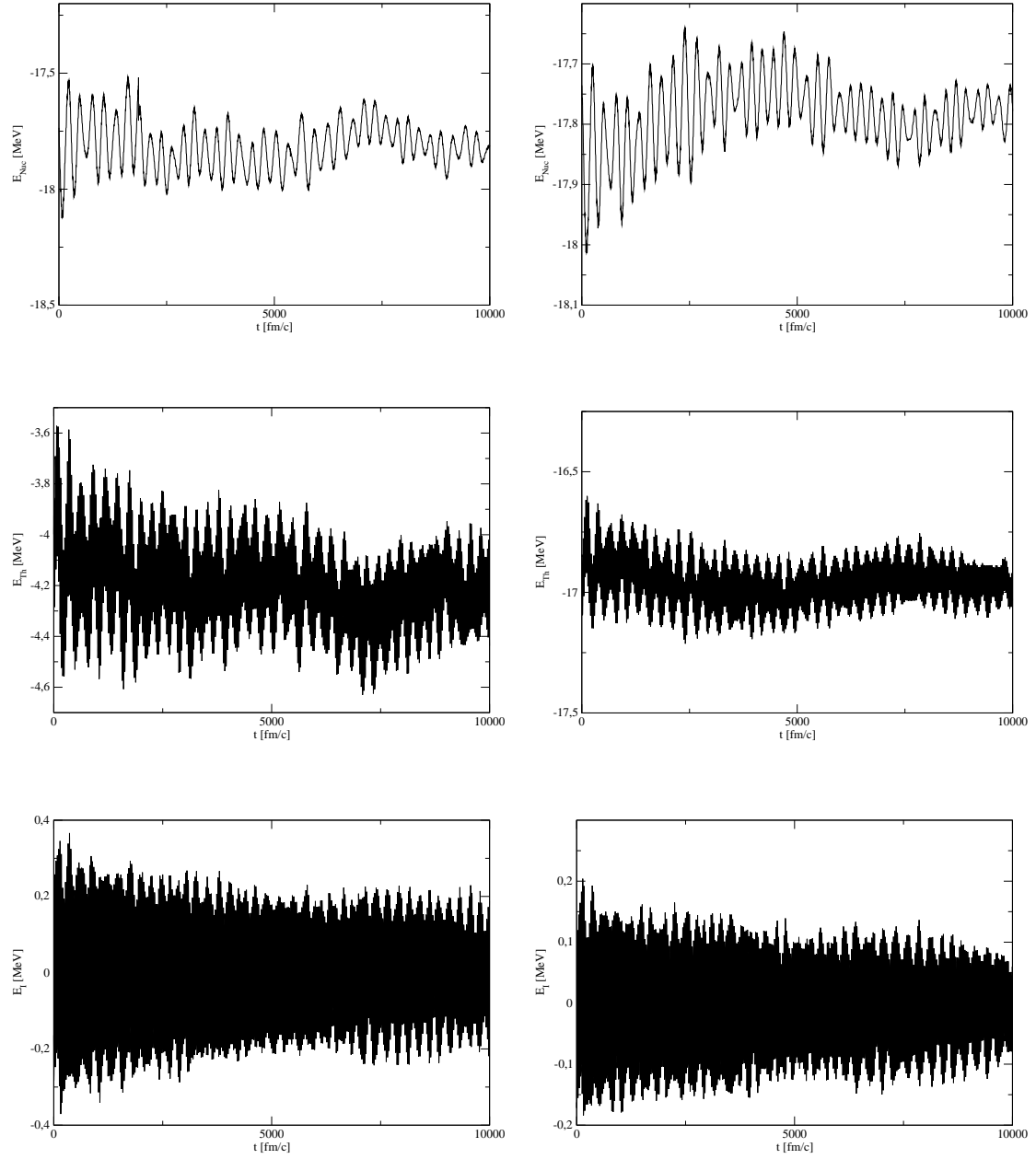


FIG. 6.1 – Figures représentant l'évolution de l'énergie du fluide nucléaire, du spin  $\frac{1}{2}$ , ainsi que celle du terme de couplage entre les deux systèmes, pour deux énergies d'excitations différentes du système. Pour cette ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie  $W_2 = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ , la fréquence du spin  $\hbar\omega = 20 \text{ MeV}$ , et la constante de couplage  $\lambda = 0.02 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . Pour les deux énergies d'excitation, il n'y a pas thermalisation du système, et des phénomènes de battements apparaissent.

**Résultats pour l'oscillateur harmonique.**

Nous avons effectué les mêmes calculs en prenant comme thermomètre l'oscillateur harmonique, en gardant pour le fluide nucléaire exactement les mêmes paramètres que pour le cas du spin  $\frac{1}{2}$ . La fréquence du thermomètre a été prise égale à  $\hbar\omega = 10.8\text{MeV}$ . À différentes énergies d'excitation pour le fluide nucléaire constitué d'un noyau d'hélium 4, les figures (6.2) montrent que l'on aboutit exactement aux mêmes conclusions que pour le cas du spin  $\frac{1}{2}$ , et la même chose est vraie si on change les valeurs des constantes pour  $W_2$ ,  $\hbar\omega$ , et  $\lambda$ . L'oscillateur harmonique n'est pas un système plus adapté que le spin  $\frac{1}{2}$ , et la phénoménologie semble être quasiment identique, dans le sens que nous rencontrons les mêmes types de problèmes pour les deux cas. Cela s'explique était prévisible en considérant la connexion que nous avons fait entre les deux systèmes à l'aide de la transformation de Holstein-Primakoff.

Le formalisme tel qu'il a été proposé ci-dessus présente donc un problème de fondement. On peut se poser plusieurs questions importantes pour essayer d'interpréter ce résultat troublant. La première est de se demander si le système n'est pas ergodique, ou tout au moins pas dans des temps raisonnables pour la simulation numérique. Il ne s'agit que de quatre particules, et il se pourrait que l'approximation de champ moyen ne permet pas assez de fluctuations pour atteindre un régime ergodique. On pourrait également se demander si l'on a choisi judicieusement le piège, dont la forme est à priori arbitraire, et/ou de même pour le choix du couplage. On peut rappeler de nouveau qu'il existe un lien très fort entre le potentiel harmonique, et les mouvements collectifs qui peuvent briser l'ergodicité [133, 41]. Cela s'explique par le fait que les opérateurs  $\hat{r}^2$ ,  $\hat{r}^2$ , et  $\hat{r} \cdot \hat{p}$  forment une algèbre de Lie fermée, et qu'en l'absence d'interaction (ou pour des interactions purement locales), un système dans un piège harmonique est intégrable, donc non ergodique. Nous tenterons de répondre à l'ensemble de ces questions dans la suite de l'exposé.



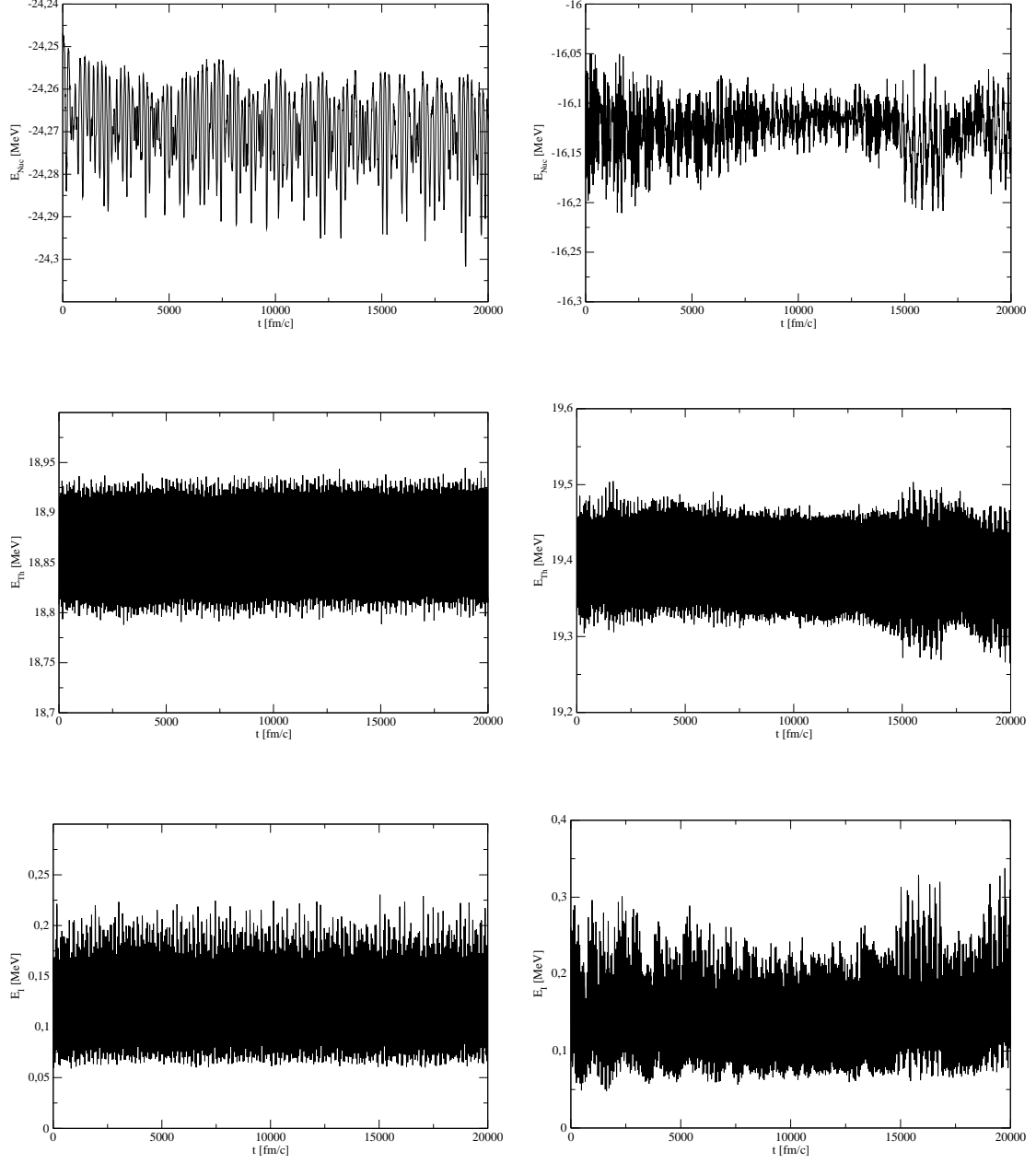


FIG. 6.2 – Figures représentant l'évolution de l'énergie du fluide nucléaire, de l'oscillateur harmonique, ainsi que celle du terme de couplage entre les deux systèmes, pour deux énergies d'excitation différentes du système. Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie  $W_2 = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ , la fréquence du thermomètre  $\hbar\omega = 10.8 \text{ MeV}$ , et la constante de couplage  $\lambda = 0.003 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ . Pour les deux énergies d'excitation, il n'y a pas thermalisation du système, et des mouvements collectifs ainsi que des phénomènes de battements apparaissent, comme pour le cas du spin  $\frac{1}{2}$ .

## 6.3 Procédure systématique de l'implémentation du thermomètre nucléaire.

### 6.3.1 Choix du type de couplage entre le thermomètre et le fluide nucléaire.

Comme nous l'avions énoncé précédemment, il est possible que l'une des sources de notre problème vienne du choix du type de couplage entre le thermomètre et le fluide nucléaire. Le spin  $\frac{1}{2}$  et l'oscillateur harmonique étant des oscillateurs, il est possible qu'ils se couplent avec le puit harmonique servant de piège au fluide nucléaire, en produisant des mouvements collectifs qui dominent l'énergétique du système. Pour illustrer notre argumentation, revenons à un cas d'école, qui est le système constitué de deux particules libres plongées dans un oscillateur harmonique, et qui interagissent entre elles par l'intermédiaire d'un couplage linéaire tel que le Hamiltonien total du système soit donné par :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HO1}} + \hat{H}_{\text{HO2}} + \hat{H}_I \quad (6.38)$$

où le couplage entre les deux oscillateurs est donné par :

$$\hat{H}_I = \lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 (\hat{x}_1 + \hat{x}_2)^2 \quad (6.39)$$

Le Hamiltonien total peut se simplifier par :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_{\text{HO}}} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_{\text{HO}}} + \left( \frac{1}{2} m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 + \lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 \right) (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2) + 2\lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 \hat{x}_1 \hat{x}_2 \quad (6.40)$$

ce qui prouve que le couplage (6.38) est bien linéaire. Les équations de mouvement pour les deux particules sont régies par :

$$m_{\text{HO}} \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -2 \left( \frac{1}{2} m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 + \lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 \right) x_1 - 2\lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 x_2 \quad (6.41)$$

$$m_{\text{HO}} \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -2 \left( \frac{1}{2} m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 + \lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 \right) x_2 - 2\lambda m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 x_1 \quad (6.42)$$

La forme de ces équations rappelle les expressions (6.22), on pourrait penser que le Hamiltonien permettrait un échange d'énergie entre les deux oscillateurs, et que l'on pourrait atteindre un équilibre thermodynamique entre les deux systèmes. Néanmoins on peut démontrer que cela est impossible. En effet en sommant et en soustrayant les équations (6.41) et (6.42), on peut obtenir un nouveau jeu d'équations données par :

$$\begin{aligned} m_{\text{HO}} \frac{d^2(x_1 + x_2)}{dt^2} &= -m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 (1 + 4\lambda)(x_1 + x_2) \\ m_{\text{HO}} \frac{d^2(x_1 - x_2)}{dt^2} &= -m_{\text{HO}} \omega_{\text{HO}}^2 (x_1 - x_2) \end{aligned} \quad (6.43)$$

Si l'on effectue le changement de variables suivant :

$$\begin{aligned} x_G &= x_1 + x_2 \\ x_R &= x_1 - x_2 \end{aligned} \quad (6.44)$$

et en définissant deux nouvelles pulsations :

$$\begin{aligned}\omega_G &= \omega_{\text{HO}}\sqrt{1+4\lambda} \\ \omega_R &= \omega_{\text{HO}}\end{aligned}\tag{6.45}$$

on obtient un système d'équations indépendantes tel que :

$$\begin{aligned}m_{\text{HO}}\frac{d^2x_G}{dt^2} &= -m_{\text{HO}}\omega_G x_G \\ m_{\text{HO}}\frac{d^2x_R}{dt^2} &= -m_{\text{HO}}\omega_R x_R\end{aligned}\tag{6.46}$$

On remarque donc que si l'on résout un système de deux oscillateurs linéairement couplés, on observera deux phénomènes périodiques bien distincts, et oscillants aux nouvelles fréquences définies par les relations de l'équation (6.45). Les figures (6.3) illustrent cet exemple, et l'on peut vérifier le découplage de deux modes aux pulsations  $\omega_R$  et  $\omega_G$ . Nous avons déjà un premier indice permettant de résoudre notre problème de thermalisation. L'idée est de prendre un couplage non-linéaire. Sachant que les deux types de

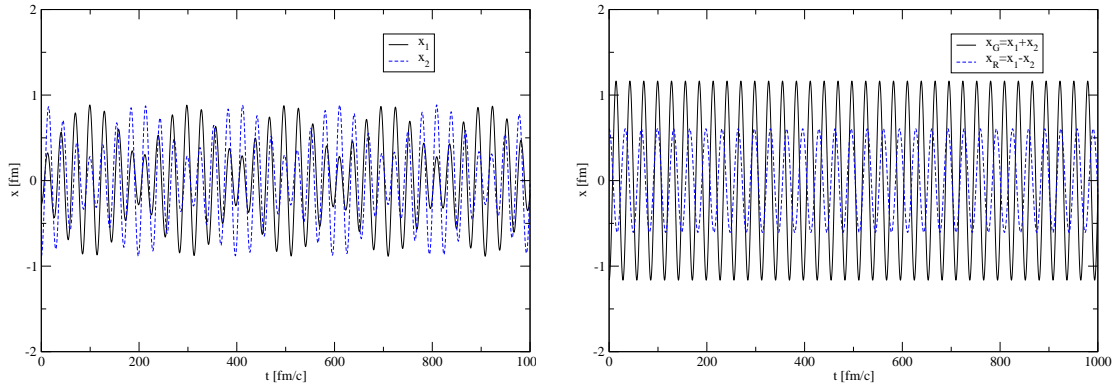


FIG. 6.3 – La figure de gauche représente l'évolution temporelle des deux oscillateurs couplés linéairement dans la base de départ. Les calculs ont été réalisés avec une fréquence  $\omega = 0.20\text{c.fm}^{-1}$ , et une constante de couplage égale à  $\lambda = 6$ . Un mouvement périodique est clairement visible avec un phénomène de battements. La figure de droite représente l'évolution temporelle des oscillateurs dans la base découplée, où l'on distingue deux phénomènes périodiques bien distincts. On vérifie parfaitement la solution analytique pour les deux modes découplés, où les fréquences des deux modes sont  $\omega_G = 5\omega$ , et  $\omega_R = \omega$ .

thermomètres introduits précédemment (spin et oscillateur) sont presque équivalents, nous nous attacherons pour la suite de l'exposé à n'utiliser que l'oscillateur harmonique comme thermomètre nucléaire. Ce choix a été réalisé pour des raisons purement techniques, car il permet une implémentation plus aisée des couplages non-linéaires, par rapport au choix du spin  $\frac{1}{2}$ . Afin d'éviter l'intégrabilité de la dynamique du thermomètre due à la linéarité des couplages, nous avons posé :

$$\hat{H}_I = \lambda \hat{r}_{\text{th}}^4 \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^4\tag{6.47}$$

En réalisant un calcul avec ce type de couplage en ayant imposé  $\lambda = 0.0005 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-8}$ , on remarque à l'aide des figures (6.4) que les phénomènes de battements ont quasiment disparu. Ceci confirme l'hypothèse que les phénomènes de battements venaient essentiellement du fait que l'on avait imposé un couplage linéaire entre les deux systèmes. On remarque néanmoins que la thermalisation n'est pas encore atteinte. Il existe une autre source de mouvement périodique (donc de dynamique intégrable) dans le système, c'est à dire le puit harmonique. Il pourrait y avoir résonance entre les fréquences propres du puits et celles l'oscillateur. Une solution possible est d'imposer un piège en  $\vec{r}^4$  avec :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Trap}} &= W_4 \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^4 \\ &= W_4 \sum_{i=1}^A (\hat{x}_i^4 + \hat{y}_i^4 + \hat{z}_i^4 + 2\hat{x}_i^2 \hat{y}_i^2 + 2\hat{x}_i^2 \hat{z}_i^2 + 2\hat{y}_i^2 \hat{z}_i^2)\end{aligned}\quad (6.48)$$

où  $W_4$  joue ici le rôle d'une hyperpression, et  $\vec{r}^4$  celui d'un hyper-volume dans un espace de dimension quatre. L'ensemble des expressions des éléments de matrice pour l'opérateur  $\hat{r}^4$ , ainsi que de leur dérivées sont données en annexe (A.7). Pour éviter tout problème de couplage entre le puits et le thermomètre, on introduit aussi un couplage non-linéaire par rapport au puits. Notre choix s'est porté sur une interaction de contact entre le fluide nucléaire et le thermomètre avec :

$$\hat{H}_I = \lambda \sum_{i=1}^A \delta(\hat{\vec{r}}_{\text{th}} - \hat{\vec{r}}_i) \quad (6.49)$$

et dont la valeur moyenne se réduit sous la forme d'une fonctionnelle de la densité tel que :

$$\mathcal{H}_I = \lambda \int d\vec{r}^3 \rho_{\text{th}}(\vec{r}) \rho_{\text{Nucéaire}}(\vec{r}) \quad (6.50)$$

où  $\rho_{\text{Nucéaire}}$  est la densité de particules du fluide nucléaire, et  $\rho_{\text{th}}$  est la densité de particule du thermomètre. Ce couplage a la propriété de produire des résultats très stables numériquement. En recommençant les mêmes calculs que précédemment, mais en imposant une interaction de contact comme couplage entre les deux systèmes, les figures (6.5) montrent que les deux systèmes s'échangent de l'énergie, et semblent converger vers un équilibre thermodynamique. Néanmoins les figures précédemment exposées montrent seulement qu'il y a échange d'énergie entre le noyau et le thermomètre sur des temps longs. Ceci est une condition nécessaire mais pas suffisante, pour que le système total ait atteint l'équilibre. Ce qui est nécessaire pour que le thermomètre mesure la température du noyau, est que que les moyennes temporelles soient égales aux moyennes sur les configurations. Il faut donc que le système total soit ergodique ; à fortiori il faut que le noyau soit ergodique. Les deux aspects de convergence vers un état d'énergie différent de la condition initiale, et d'ergodicité ne sont donc pas nécessairement connectés. Le prochain test que nous devons réaliser, est de déterminer si notre système est bien ergodique.

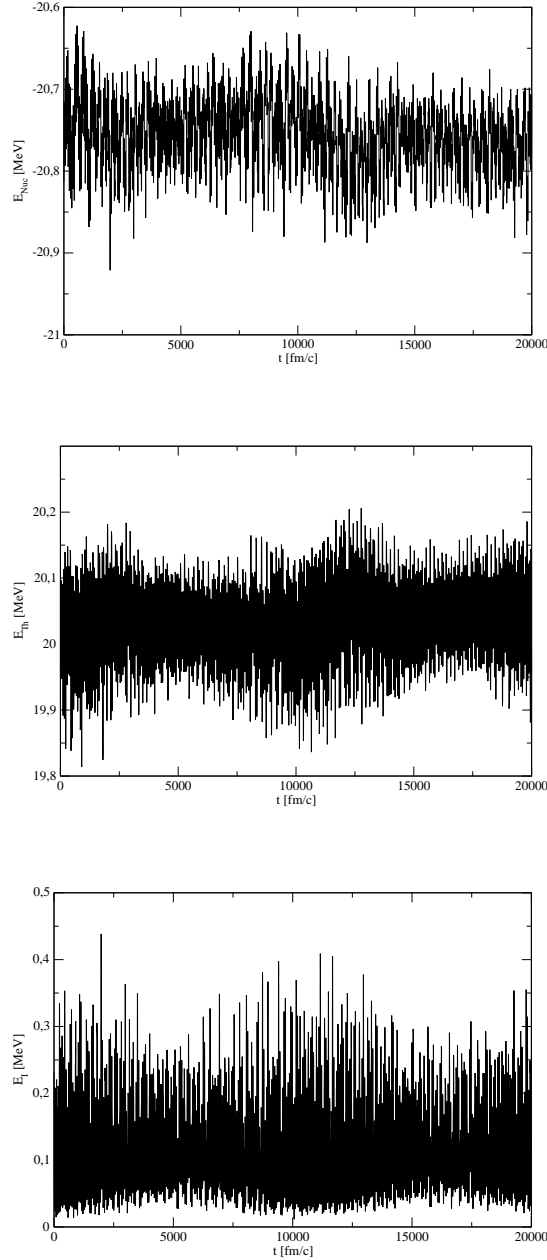


FIG. 6.4 – Figures représentant l'évolution de l'énergie du fluide nucléaire, de l'oscillateur harmonique, ainsi que celle du terme de couplage entre les deux systèmes. Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie  $W_2 = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ , la fréquence du thermomètre  $\hbar\omega = 10.8 \text{ MeV}$ , et la constante de couplage  $\lambda = 0.0005 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-8}$ . Contrairement aux deux systèmes précédents le couplage a été imposé de telle sorte à être non-linéaire, et à respecter l'équation (6.47). On peut remarquer que par rapport aux figures (6.1) et (6.2), les phénomènes de battements ont disparu. La thermalisation de l'ensemble ne semble pas encore avoir été atteinte.

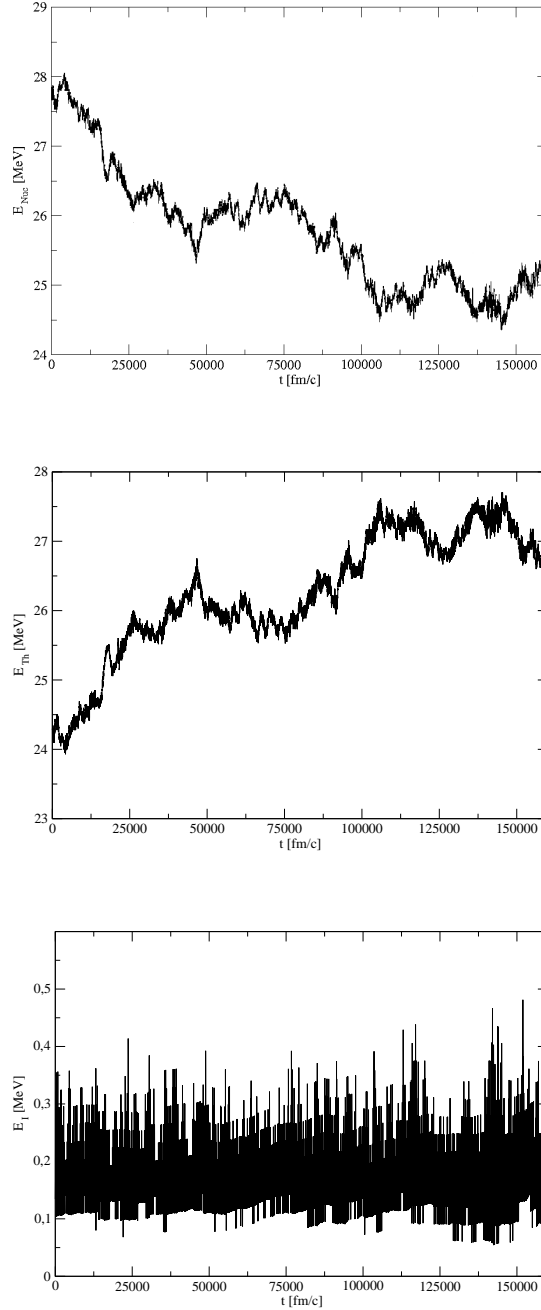


FIG. 6.5 – Figures représentant l'évolution de l'énergie du fluide nucléaire, de l'oscillateur harmonique, ainsi que celle du terme de couplage entre les deux systèmes. Le calcul est réalisé pour un piège en  $r^{-4}$ , où la constante du piège a été choisie  $W_4 = 0.01 \text{MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ , la fréquence du thermomètre  $\hbar\omega = 10.8 \text{MeV}$ , et la constante de couplage  $\lambda = 6 \text{MeV} \cdot \text{fm}^3$ . Le couplage a été imposé de telle sorte à être une interaction de contact, et à respecter l'équation (6.47). L'énergetique semble atteindre un équilibre sur des temps asymptotiques.

## 6.4 Étude de l'ergodicité du système.

### 6.4.1 Introduction : Phénomènes ergodiques et chaotiques.

L'ensemble des calculs statistiques que nous projetons de réaliser pour les systèmes finis, utilise le principe d'ergodicité. Ce dernier exprime le fait que l'on peut remplacer les moyennes temporelles, par les moyennes sur l'ensemble statistique définies par les lois de conservation respectées par la dynamique pour l'ensemble microcanonique. Cela constitue le théorème ergodique de Birkhoff [139, 140]. La totalité des systèmes dynamiques ne respecte pas cette condition, bien qu'il s'agisse d'une propriété attendue, tout au moins à la limite classique pour la plupart des systèmes complexes. Il est donc possible que notre système fini ne respecte pas cette condition. Nous allons proposer une méthodologie au cours de cette sous-partie, nous permettant de valider le principe d'ergodicité pour le système étudié. Commençons par énumérer les principaux types de systèmes dynamiques. Les systèmes intégrables constituent le cas des systèmes dynamiques les plus simples à étudier. L'espace des phases pouvant être représenté par un tore, leurs trajectoires sont caractérisées par des hélices qui s'enroulent autour de ce tore, et se referment au bout d'un certain nombre de tours. Les trajectoires étant régulières et périodiques, le système n'explore pas tout le tore pour ce type de système, et l'on dit que le tore est résonnant. De plus il présente des pulsations propres qui sont commensurables. L'autre cas particulier de système dynamique est le cas de certains systèmes intégrables perturbés, et qui même après perturbation continuent à admettre des tores invariants, pouvant subsister dans des régions de mesure finie de l'espace des phases. Ce type de situations correspond à des îlots où la dynamique reste quasi-périodique, et d'après le théorème KAM (Kolmogorov, Arnold et Moser) [140], ils ne correspondent pas nécessairement à des systèmes ergodiques. Enfin le dernier type de systèmes dynamiques qui nous intéressent, est le cas des systèmes chaotiques. Leurs évolutions dépendent très sensiblement des conditions initiales. Leurs pulsations propres ne sont pas commensurables, et leurs trajectoires dans l'espace des phases sont des hélices qui s'enroulent sur le tore sans repasser deux fois par le même point. Si l'on attend suffisamment longtemps, toute portion du tore, aussi petite soit-elle sera visitée à un moment donné. On dit que l'espace des phases est exploré de manière dense pour le cas des systèmes chaotiques, et le tore est non résonnant. Les systèmes classiques obéissant à des équations de mouvements non-linéaire montrent généralement des caractéristiques chaotiques [140]. Etant donné que nous résolvons des équations de mouvement hautement non linéaires, il est donc très probable que le système soit chaotique, qu'il explore densément l'espace des phases, et donc par conséquent qu'il soit ergodique. La plupart des définitions et des théorèmes sur le chaos et l'ergodicité ont été obtenus dans le cadre de la mécanique classique, dans laquelle le concept de trajectoire, et d'espace des phases sont univoquement définis. Toutes les observables, en particulier la position et l'impulsion, peuvent être mesurées simultanément. Si le concept de système intégrable (en particulier périodique) peut s'étendre sans difficulté de la mécanique classique à la mécanique quantique, ceci n'est plus vrai pour les systèmes chaotiques. La définition de chaos quantique n'est pas encore établie univoquement. On fait souvent l'hypothèse qu'un système quantique est chaotique, si son analogue classique est chaotique. Toutefois il n'est pas démontré que de l'ergodicité de l'un, découle l'ergodicité de l'autre. Dans cette étude, en s'appuyant sur les fortes connexions du modèle FMD avec la mécanique classique d'un système en interaction, nous prendrons les indicateurs de chaos classique en faisant l'hy-

pothèse implicite, qu'ils restent valables pour la dynamique FMD. À l'aide de différents outils nous allons démontrer, que le système appartient à la troisième catégorie de systèmes dynamiques énumérés précédemment. Nous commencerons par vérifier à l'aide de spectres en Fourier que le système ne présente pas de fréquences commensurables, ensuite nous poursuivrons notre étude par des sections de Poincaré, afin de montrer visuellement que l'espace des phases est densément exploré. Enfin nous extrairons une quantité qui peut caractériser le chaos appelée exposant de Lyapunov. Remarquons que la chaotité de la dynamique est une condition suffisante, mais non nécessaire pour que les moyennes temporelles coïncident avec les moyennes statistiques. Même si nous ne pouvons pas démontrer de façon rigoureuse l'existence d'un régime chaotique, la présence d'une de très grande sensibilité aux conditions initiales sera tout de même un argument fort, justifiant l'application du théorème ergodique. Notons que dans les études précédentes [74], l'ergodicité a été tout simplement supposée sans vérification.



### 6.4.2 Section de Poincaré.

La section de Poincaré, ou coupe de Poincaré [140, 141, 142, 143, 144, 145], constitue l'un des outils les plus utilisés pour établir la présence de chaotité d'un système dynamique classique. L'idée de Poincaré est de représenter dans un plan de l'espace des phases de dimension  $\mathfrak{R}^{2N}$ , une trajectoire se déployant dans un sous espace de dimension  $N - 1$ . La coupe de Poincaré consiste en un ensemble de points, qui intersectent un hyperplan des  $c_i$  (qui représentent les positions ou les impulsions), et ceci dans une direction bien déterminée. On peut par exemple effectuer une coupe dans le plan où l'ensemble des positions sont nulles, et pour lequel les impulsions sont toutes positives afin de déterminer la direction. Si l'on considère un temps d'évolution du système qui tend vers l'infini, la représentation de Poincaré est constituée d'une succession de points dont l'agencement va nous donner des informations sur la nature du système. Si l'ensemble des points décrit une trajectoire fermée, alors le système est stable, et si ils remplissent densément la section, alors le système est chaotique. Dans le cas d'un système d'Hélium 4 piégé dans un puits, l'espace des phases est de dimension 80. En pratique il est très difficile de réaliser une section dans un espace aussi grand, et la probabilité pour que l'on obtienne un point sur la section de Poincaré est très faible. Il faudrait pour cela laisser le système évoluer pendant un temps excessivement trop long. Dans la littérature, la plupart des systèmes étudiés à l'aide de cette méthode présente un espace des phases qui est typiquement dix fois plus petit. Les références [143, 144, 145] en sont de parfaites illustrations. La figure (6.6) montre la coupe réalisée pour une durée de 200000 fm/c. On peut remarquer que le résultat final ne semble pas concluant.

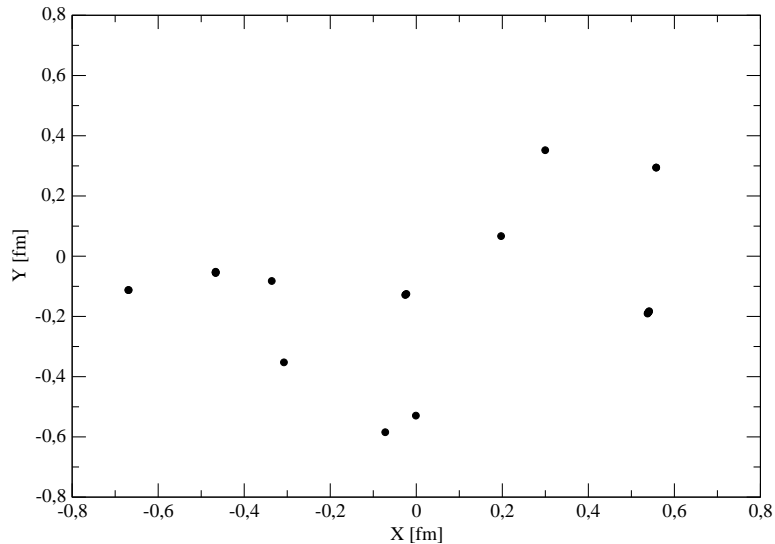


FIG. 6.6 – Figures représentant la section de poincaré pour un système d'Hélium 4 piégé dans un puits où l'espace des phases est de dimension 80. La section est réalisée dans le plan où l'ensemble des positions sont nulles, et pour lequel les impulsions sont toutes positives afin de déterminer la direction. L'ensemble des points est obtenu pour une durée de 200000 fm/c.

### 6.4.3 Spectre en fréquence.

Un des outils permettant de caractériser le chaos est de réaliser un spectre en fréquence des positions, et des impulsions d'une des particules du système. Contrairement aux systèmes périodiques, les systèmes chaotiques ne présentent pas de régularité, et ils ne devraient donc pas présenter de fréquences caractéristiques. Si l'on réalise un spectre en fréquence d'un système chaotique, on devrait donc obtenir un bruit blanc. En réalité il existe des systèmes intégrables qui ne présentent pas de fréquences caractéristiques, et qui peuvent présenter un spectre en Fourier caractérisé par un bruit blanc. C'est le cas des systèmes non périodiques avec des équations de mouvement qui toutefois peuvent être intégrées analytiquement. De telles trajectoires peuvent être interprétées comme des tores, mais de dimension nulle. Un des exemples les plus célèbres est celui régi par l'équation différentielle :

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \gamma^2 x = 0 \quad (6.51)$$

où  $\gamma$  est une constante réelle strictement positive. Ce système présente une solution analytique qui n'admet pas de fréquence caractéristique, et son analyse en Fourier donne un bruit blanc. L'obtention d'un bruit blanc par analyse de Fourier ne constitue donc pas une condition suffisante pour caractériser un phénomène chaotique. Les spectres en Fourier associés aux positions et aux impulsions sont réalisés à l'aide d'une transformation de Fourier numérique, c'est à dire en utilisant la transformation de Hilbert du signal. Cette transformation correspond au module de la transformée de Fourier calculée numériquement sur un intervalle de temps fini :

$$\begin{aligned} F_i(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left| \int_0^{T_{max}} e^{-i\omega t} c_i(t) dt \right| \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\left( \int_0^{T_{max}} \cos(\omega t) c_i(t) dt \right)^2 + \left( \int_0^{T_{max}} \sin(\omega t) c_i(t) dt \right)^2} \end{aligned} \quad (6.52)$$

où les  $c_i$  peuvent correspondre soit aux positions, soit aux impulsions d'une des particules du système. Les figures (6.7) et (6.8) montrent la superposition des spectres en fréquences des positions et impulsions d'une des particules piégées dans un puits harmonique, où l'on a branché progressivement l'interaction nucléaire entre les particules. En l'absence d'interaction, on peut remarquer que l'on obtient la fréquence caractéristique du puit harmonique. En branchant pas à pas l'interaction nucléaire, cette dernière persiste, et le spectre en fréquence a tendance à s'aplatir. Néanmoins on ne peut pas vraiment conclure sur la chaotité d'un système de particules plongées dans un puit harmonique, car le puit harmonique a tendance à ajouter sa composante qui domine en majeure partie le spectre en fréquences. Il est donc possible que le système soit chaotique mais que l'ensemble du système présente des vibrations collectives attendues au niveau théorique [133, 41]. En réitérant la même manipulation pour un système de particules plongées dans un piège en  $\vec{r}^4$ , les figures (6.9) et (6.10) montrent qu'en l'absence d'interaction nucléaire, ils existent plusieurs fréquences propres, ce qui nous permet de confirmer que le risque de couplage entre le puits, et le thermomètre est moindre que pour le cas précédent. Ensuite on peut remarquer que le spectre en fréquence s'aplatit de manière assez significative. Toutefois aussi dans ce cas, le bruit blanc n'apparaît pas clairement, car certaines fréquences semblent persister même lorsque l'interaction est entièrement branchée. On peut ajouter que

les systèmes quantiques obéissent à des règles de quantifications, et il ne semble pas évident qu'on puisse véritablement avoir un bruit blanc. Nous savons qu'un critère de chaoticité pour les systèmes quantiques est le fait que la distribution des espacements entre les niveaux d'énergie suit le GOE [146, 147], très différentes d'une distribution de Poisson, et dont la transformation de Fourier n'est pas forcément un bruit blanc. L'analyse en Fourier n'est donc pas concluante en ce qui concerne la chaoticité. Elle apporte uniquement des éléments supplémentaires permettant d'appuyer notre argumentation sur les possibles phénomènes de couplage qui pourraient exister. Nous allons maintenant utiliser un autre outil permettant de tester le chaos, l'évaluation du nombre caractéristique de Lyapunov du système [140, 141, 142]. Nous verrons que son estimation va nous permettre d'obtenir une meilleure détermination de la chaoticité de notre système.

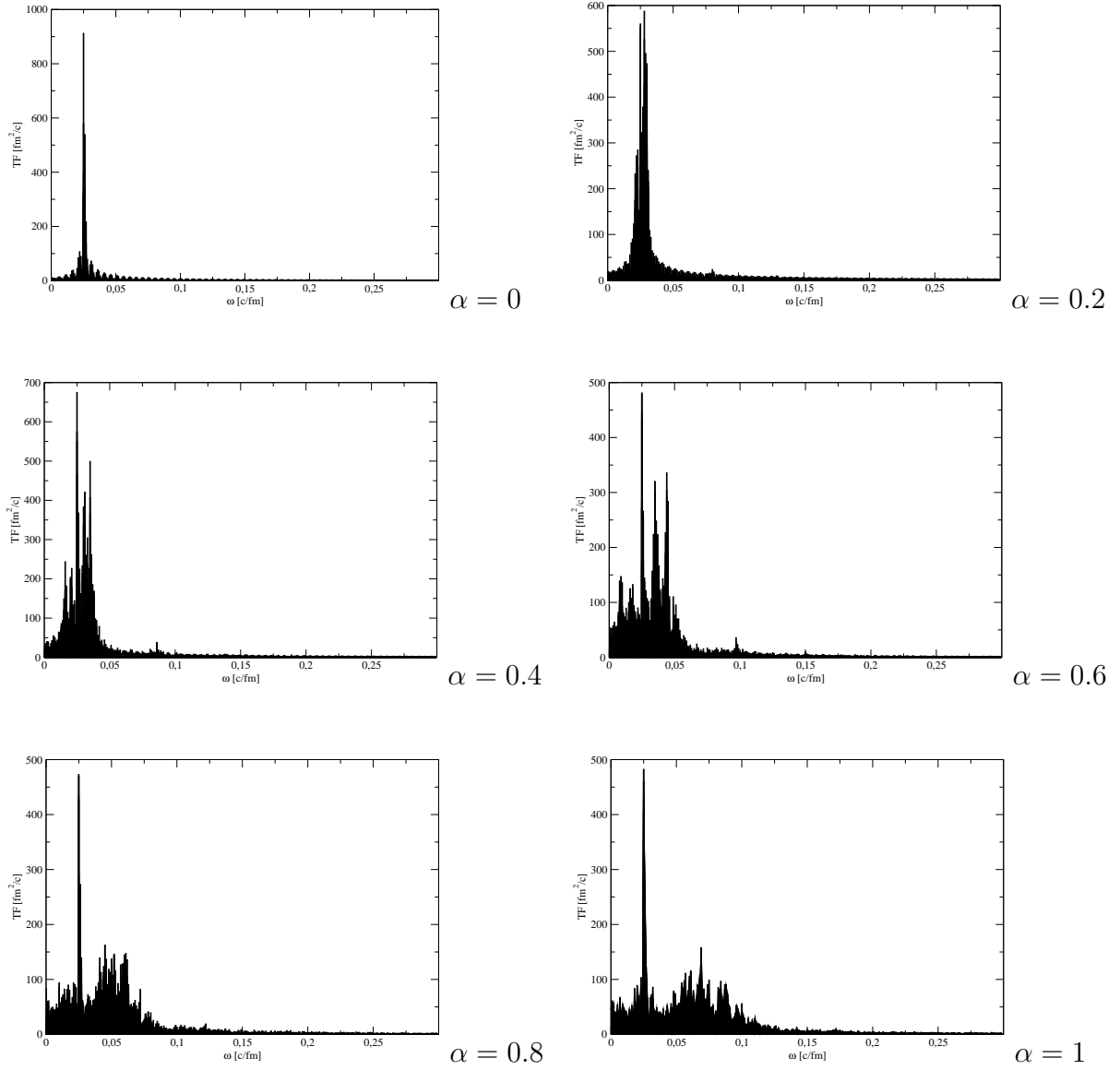


FIG. 6.7 – Superposition des spectres en Fourier des composantes du vecteur position d'une des particules du noyau d'un noyau hélium 4 plongé dans un puit harmonique. Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie étant égale à  $W_2 = 0.3\text{MeV}\cdot\text{fm}^{-2}$ . L'ensemble des figures représente les spectres pour un branchement progressif de l'interaction nucléaire, où l'interaction est multipliée arbitrairement par une constante de couplage  $\alpha$  adimensionnée. En l'absence d'interaction nucléaire, on retrouve bien la fréquence caractéristique du puit harmonique. On remarque progressivement l'aplatissement du spectre, et la disparition progressive des fréquences privilégiées, lorsque l'on branche l'interaction nucléaire. Néanmoins la fréquence du puit harmonique reste dominante même lorsque l'interaction est entièrement implémentée.

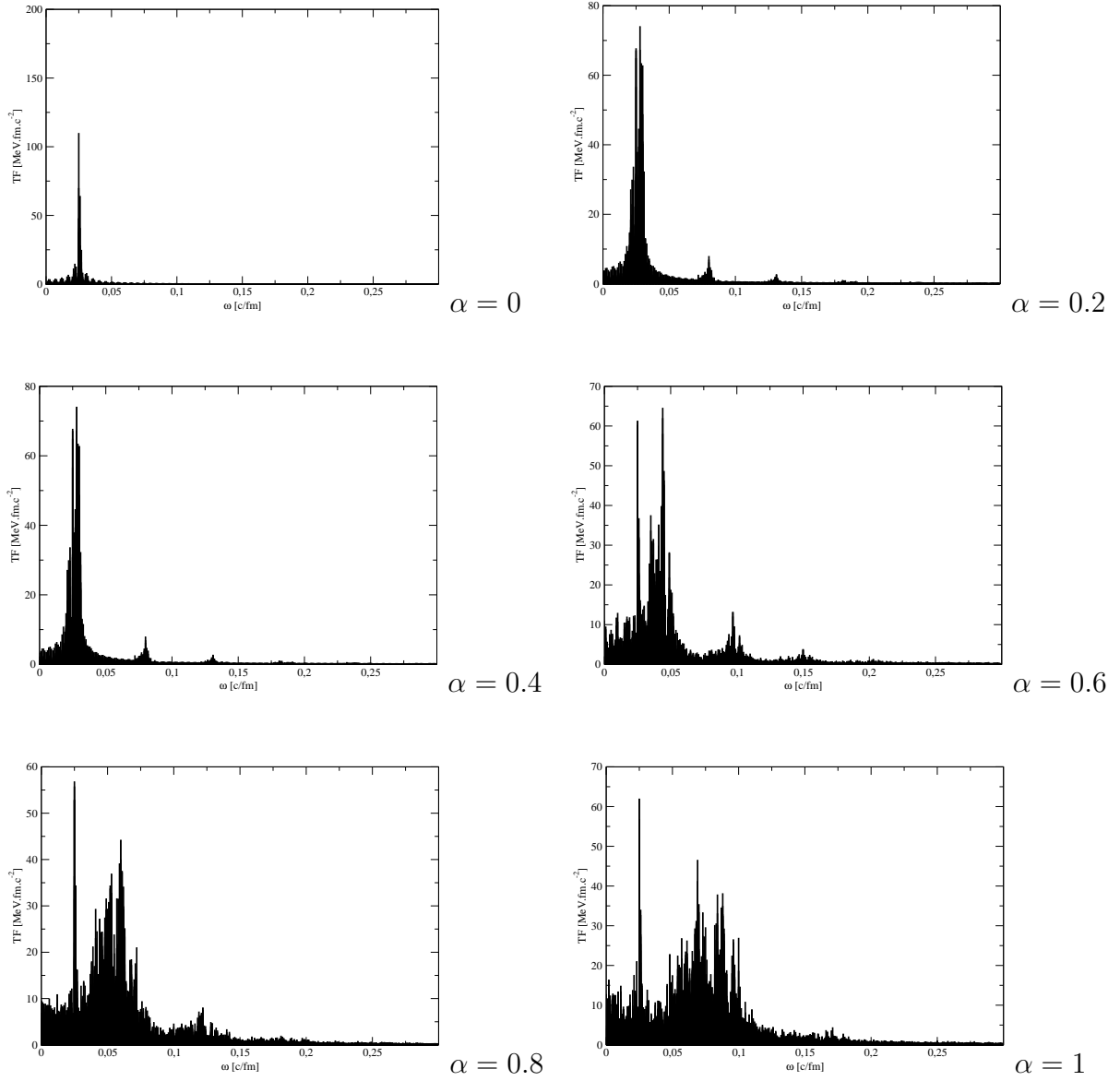


FIG. 6.8 – Superposition des spectres en Fourier des composantes du vecteur impulsion d'une des particules du noyau d'un noyau hélium 4 plongé dans un puits harmonique. Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie étant égale à  $W_2 = 0.3 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$ . L'ensemble des figures représente les spectres pour un branchement progressif de l'interaction nucléaire, où l'interaction est multipliée arbitrairement par une constante de couplage  $\alpha$  adimensionnée. En l'absence d'interaction nucléaire, on retrouve bien la fréquence caractéristique du puits harmonique. On remarque progressivement l'aplatissement du spectre, et la disparition progressive des fréquences privilégiées, lorsque l'on branche l'interaction nucléaire. Néanmoins la fréquence du puits harmonique reste dominante même lorsque l'interaction est entièrement implémentée.

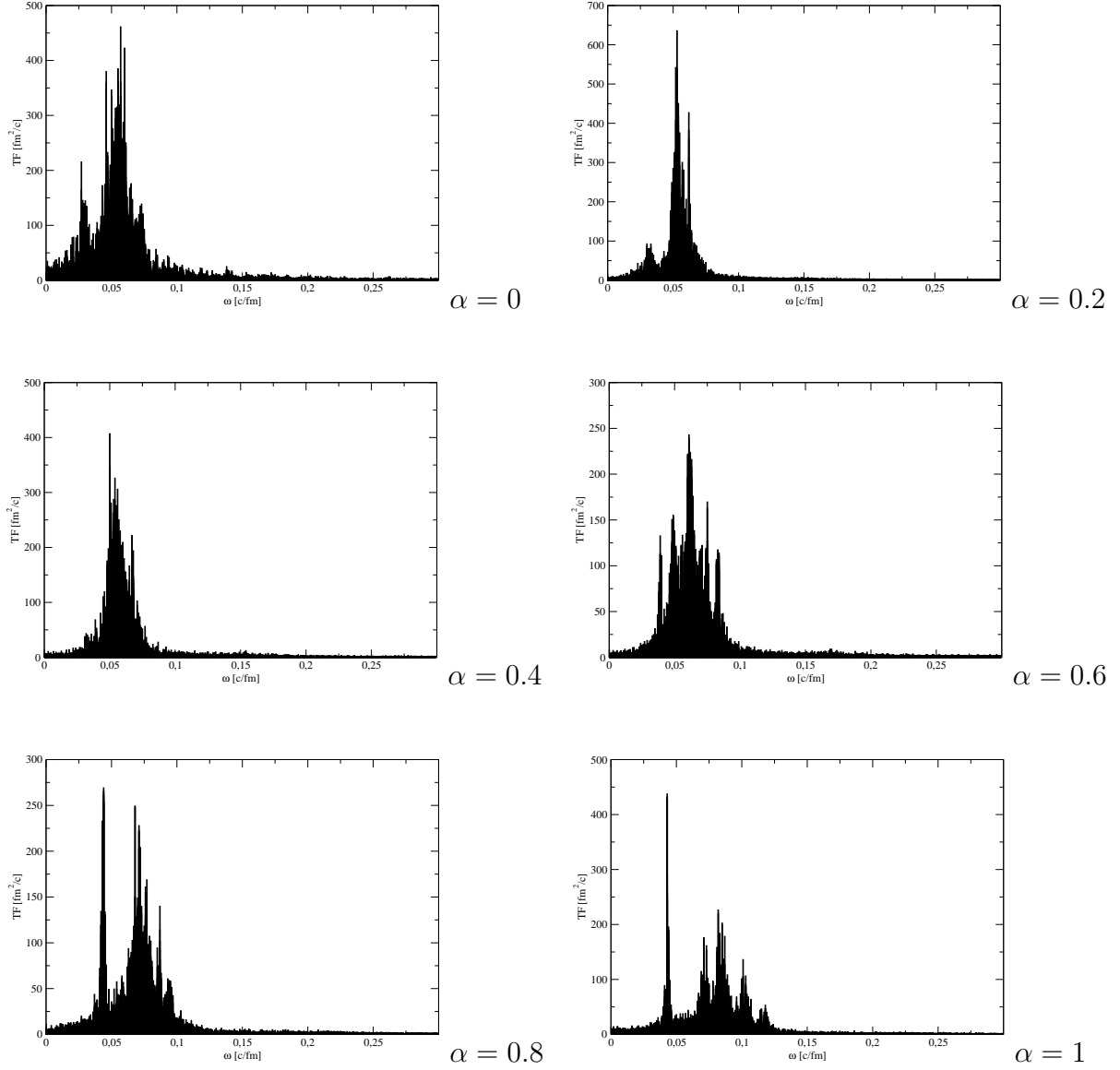


FIG. 6.9 – Superposition des spectres en Fourier des composantes du vecteur position d'une des particules du noyau d'un noyau hélium 4 plongé dans un puit en  $\bar{r}^4$ . Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie étant égale à  $W_4 = 0.03 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ . L'ensemble des figures représente les spectres pour un branchement progressif de l'interaction nucléaire, où l'interaction est multipliée arbitrairement par une constante de couplage  $\alpha$  adimensionnée. En l'absence d'interaction nucléaire, on remarque qu'il n'existe plus de fréquence caractéristique. Lors du branchement progressif de l'interaction, le spectre s'aplatit sans pour autant éliminer les fréquences caractéristiques.

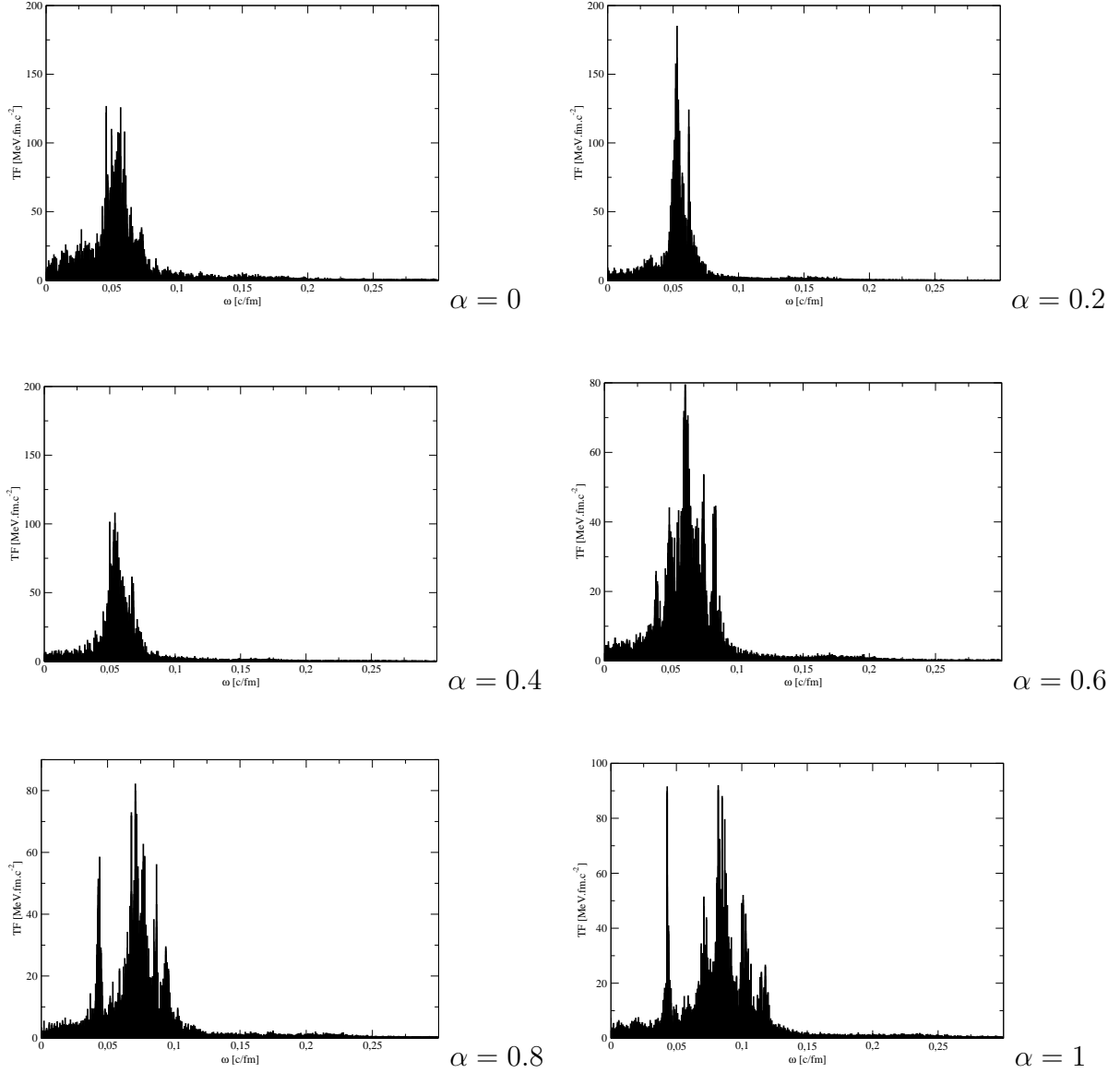


FIG. 6.10 – Superposition des spectres en Fourier des composantes du vecteur impulsion d’une des particules du noyau d’un noyau hélium 4 plongé dans un puit en  $\bar{r}^4$ . Pour cet ensemble de calculs, la constante du piège a été choisie étant égale à  $W_4 = 0.03 \text{ MeV.fm}^{-4}$ . L’ensemble des figures représente les spectres pour un branchement progressif de l’interaction nucléaire, où l’interaction est multipliée arbitrairement par une constante de couplage  $\alpha$  adimensionnée. En l’absence d’interaction nucléaire, on remarque qu’il existe plus de fréquence caractéristique. Lors du branchement progressif de l’interaction, le spectre s’aplatit sans pour autant éliminer les fréquences caractéristiques.

### 6.4.4 Calcul de l'exposant de Lyapunov.

Au cours de cette sous-partie nous allons détailler, et mettre en application une méthode plus puissante que l'analyse de Fourier, et que la section de Poincaré. Cette méthode consiste à extraire l'exposant de Lyapunov qui peut permettre de caractériser le chaos [140, 141, 142]. Notons par  $\vec{y}$  l'ensemble des  $N$  variables que nous allons analyser pour caractériser la chaotité du système. En physique classique  $\vec{y}$  représenterait l'ensemble des positions et impulsions des particules, régies par des équations différentielles qui peuvent s'écrire en toute généralité par :

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}(\vec{y}, t) \quad (6.53)$$

En mécanique statistique, on utilise le terme "flot" pour dénoter une telle expression. Dans notre cas, nous remplacerons les coordonnées des particules par les paramètres variationnels  $q_\mu$ . On peut toujours trouver une trajectoire du type  $\vec{y}_0(t)$ , et étudier son écart  $\delta\vec{y}(t) = \vec{y}(t) - \vec{y}_0(t)$  si l'on modifie d'une quantité infinitésimale ses conditions initiales avec :

$$\vec{y}(0) = \vec{y}_0(0) + \delta\vec{y}(0) \quad (6.54)$$

En linéarisant au première ordre le flot autour de la trajectoire  $\vec{y}_0(t)$  on obtient le développement suivant :

$$\frac{d\delta\vec{y}}{dt} = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \delta\vec{y} \quad (6.55)$$

où  $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}$  est une matrice qui dépend à la fois du flot, ainsi que de la solution  $\vec{y}_0(t)$ . Sauf cas exceptionnel, la résolution analytique de l'équation (6.55) s'avère impossible. Néanmoins son intégration numérique peut être toujours menée, et l'on peut déterminer une matrice  $L(t)$  donnant l'évolution de l'écart en fonction de l'écart initial :

$$\delta\vec{y}(t) = L(t)\delta\vec{y}(0) \quad (6.56)$$

La matrice  $L(t)$  est une matrice carrée de dimension  $N \times N$ , que l'on peut diagonaliser dans la base des vecteurs propres des  $\delta\vec{y}(t)$ . On aboutit donc à une matrice diagonale, dont les  $N$  valeurs propres éventuellement complexes, admettent la forme analytique suivante :

$$L(t) = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} & 0 & \dots & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & 0 & e^{\lambda_{N-1} t} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & e^{\lambda_N t} \end{pmatrix} \quad (6.57)$$

où en générale on a  $\lambda_i = \lambda_i(t)$ . On peut toujours calculer la trace du produit de cette matrice par son Hérmite conjugué où :

$$\text{tr} (L^\dagger(t)L(t)) = e^{(\lambda_1 + \lambda_1^*)t} + e^{(\lambda_2 + \lambda_2^*)t} + \dots + e^{(\lambda_{N-1} + \lambda_{N-1}^*)t} + e^{(\lambda_N + \lambda_N^*)t} \quad (6.58)$$

et on définit exposant de Lyapunov la quantité suivante :

$$\bar{\lambda} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \ln (\text{tr} (L^\dagger(t)L(t))) \quad (6.59)$$



Nous pouvons remarquer que  $\bar{\lambda}$  représente la valeur asymptotique des coefficients  $\lambda_i(t)$  ayant la partie réelle la plus grande, c'est à dire le coefficient d'écart exponentiel maximal entre deux trajectoires, ayant des conditions initiales proches. Grâce à cette astuce, on est donc capable de déterminer la plus grande partie réelle  $\bar{\lambda}$ , sans être obligés d'appliquer les méthodes habituelles de détermination des valeurs propres d'une matrice. Il est important de remarquer que la forme exponentielle trouvée pour la matrice  $L(t)$  avec  $\lambda_i(t) = \text{cte}$  n'est pas générale, car le plus souvent la matrice  $\frac{\partial \vec{f}}{\partial y}$  est dépendante du temps. Dans ce cas, cette dernière n'admet pas de valeurs propres constantes, et de plus la matrice  $L(t)$  ne peut être diagonalisée dans un repère fixe au cours du temps. Néanmoins des théorèmes, dits théorèmes ergodiques multiplicatifs [141, 142], permettent de définir pour une très large catégorie de situations, l'existence de la quantité  $\bar{\lambda}$  régie par l'équation (6.59), comme étant égale au nombre caractéristique de Lyapunov. Pour le cas des systèmes chaotiques, ce nombre doit être strictement positif, c'est à dire qu'il va caractériser un coefficient d'écart exponentiel constant dans l'espace des phases de la trajectoire  $\vec{y}(t)$  par rapport à la trajectoire  $y_0(t)$ , lorsque l'on modifie la condition initiale d'une quantité infinitésimale. Si un tel exposant existe, l'exponentielle ayant la partie réelle la plus grande dominera la somme (6.58), et nous pourrions écrire :

$$\bar{\lambda} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln(D_\lambda(t)) \quad (6.60)$$

où  $D_\lambda$  est la distance de Lyapunov qui mesure l'écartement entre les deux trajectoires dans l'espace des phases définis par :

$$D_\lambda(t) = \sqrt{\sum_{i=1}^N \omega_i \delta y_i(t)^2} \quad (6.61)$$

On peut maintenant mettre en application cette méthode, afin de tester la chaotité de notre système constitué d'un noyau d'hélium 4 piégé, aussi bien dans un puit harmonique, que dans un piège en  $\vec{r}^4$ . On part d'une condition initiale  $\vec{y}_0(0)$ , pour l'ensemble des paramètres des gaussiennes, auquel nous ajoutons une variation infinitésimale qui est de l'ordre du dix-millième. Ce calcul est itéré cinquante fois de telle sorte à obtenir un ensemble de 1250 couples d'écartement dans l'équivalent FMD de l'espace des phases classiques, et ensuite déterminer un écartement moyen à l'aide de l'équation (6.61). Les figures (6.11) et (6.12) montrent le logarithme de l'écartement des différents paramètres des gaussiennes en fonction du temps. On peut remarquer que leur écartement croît de manière exponentielle au cours du temps pour les deux types de piège. La saturation que l'on observe par la suite est due au fait que l'espace des phases est de dimension finie, ce qui limite l'écartement possible des différents paramètres à des valeurs limite. A l'aide de ces courbes, nous ne pouvons déterminer si il s'agit de nombres de Lyapunov individuels pour chacun des paramètres. Pour cela il aurait fallu trouver la matrice  $L(t)$ , et en déduire les valeurs propres associées. Néanmoins on peut déterminer le nombre de Lyapunov total  $\bar{\lambda}$  pour chacun des deux types de systèmes, et ceci en calculant l'écartement total, c'est à dire la distance de Lyapunov. Etant donné que l'espace des phases est de dimension finie, on ne peut en pratique faire tendre le temps vers l'infini. On doit se contenter des portions de courbes pour lesquelles le logarithme de la distance de Lyapunov ne sature pas, c'est à dire celles où la croissance est linéaire. Le coefficient directeur de la pente sera égale à l'exposant  $\bar{\lambda}$ . Les figures (6.13) représentent le logarithme des distances de Lyapunov pour

les deux types de piège. On trouve des nombres de Lyapunov positifs, qui pour le piège harmonique, et le piège en  $\vec{r}^4$  sont donnés dans le tableau (6.1). On en déduit donc que le système est chaotique. Il remplit densément l'espace des phases, ce qui implique qu'il est ergodique pour les deux pièges utilisés. L'extraction des nombres de Lyapunov permet donc d'avoir un critère sur la chaoticité des systèmes, beaucoup plus claire que les spectres en Fourier, ou la section de Poincaré. L'extraction du nombre de Lyapunov est un argument assez fort nous permettant de confirmer la nature chaotique de notre système. Le système de nucléons piégés dans le piège harmonique étant bien ergodique, cela confirme que le problème de thermalisation était essentiellement dû à un problème de couplage entre le puits et le thermomètre. On peut remarquer que dans le cas de certains systèmes intégrables, on aurait pu aussi trouver un exposant de Lyapunov positif. Un des exemples simples est le système dynamique défini par l'équation différentielle (6.51). Néanmoins en ce qui nous concerne, nous intégrons des systèmes d'équations différentielles hautement non linéaires, et il est très peu probable que nous rencontrions ce genre de situation pour un système de particules en interaction.

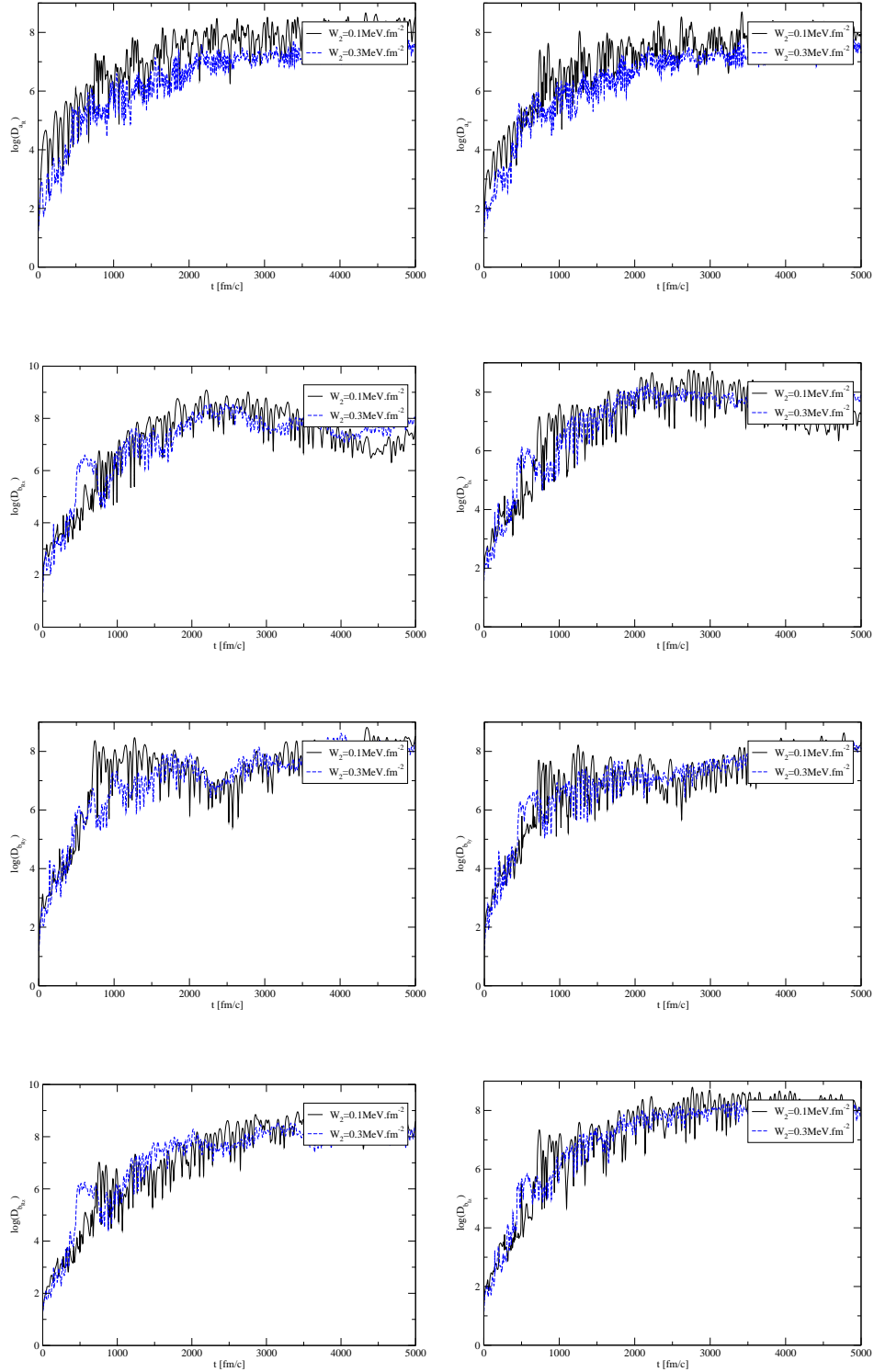


FIG. 6.11 – Représentation du logarithme des différents écartements moyens, pour chacun des paramètres des gaussiennes. Leur estimation a été évaluée sur un ensemble de 1250 couples pour un noyaux d'hélium piégé dans un puit harmonique, pour deux valeurs de la constante du piège  $W_2$ . Pour les deux cas on peut remarquer qu'il y a une croissance exponentielle, puis saturation due à la dimension finie de l'espace des phases.

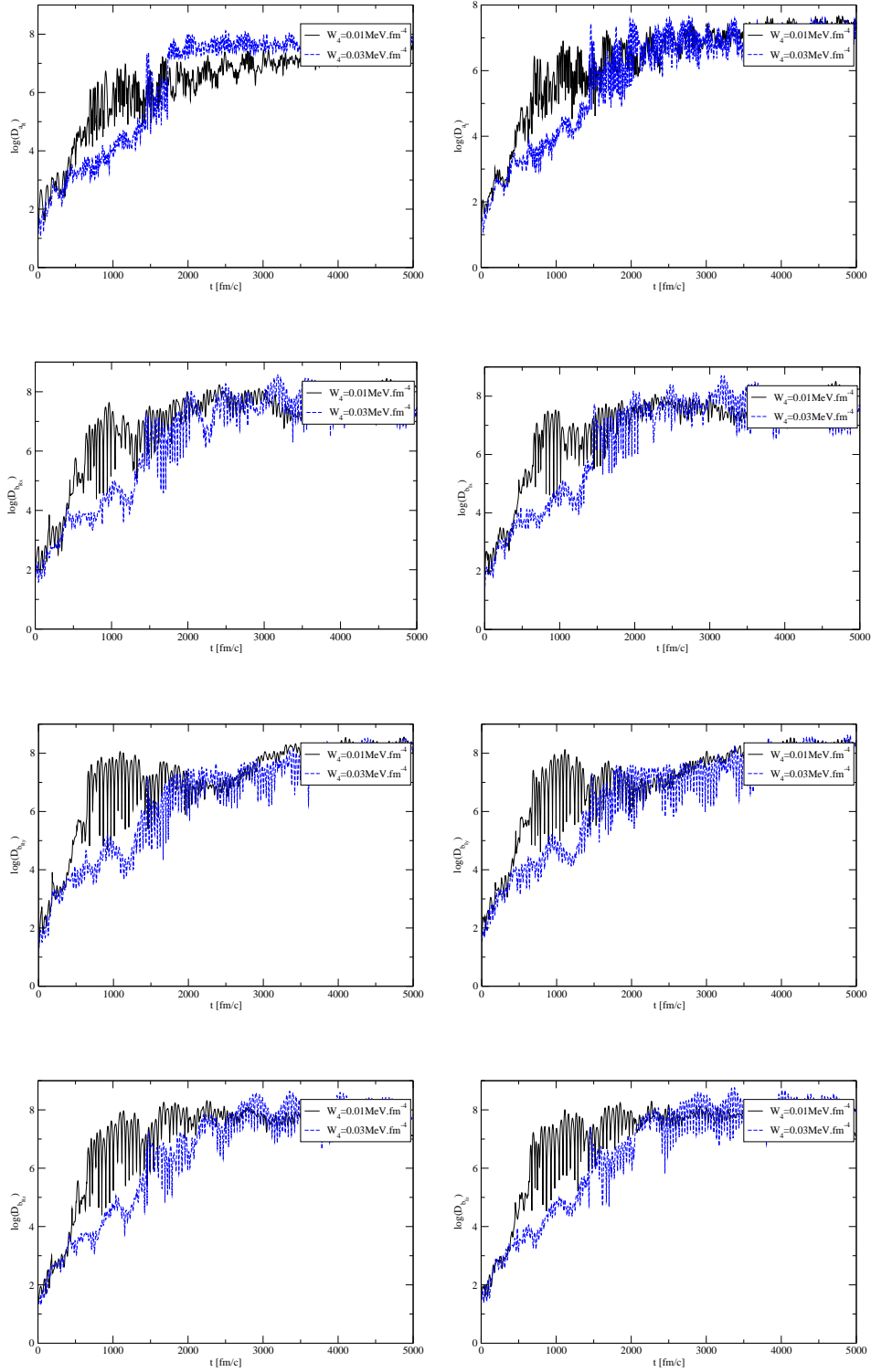


FIG. 6.12 – Représentation du logarithme des différents écartements moyens, pour chacun des paramètres des gaussiennes. Leur estimation a été évaluée sur un ensemble de 1250 couples pour un noyaux d'hélium piégé dans un puit en  $\bar{r}^4$ , pour deux valeurs de la constante du piège  $W_4$ . Pour les deux cas on peut remarquer qu'il y a une croissance exponentielle, puis saturation due à la dimension finie de l'espace des phases.

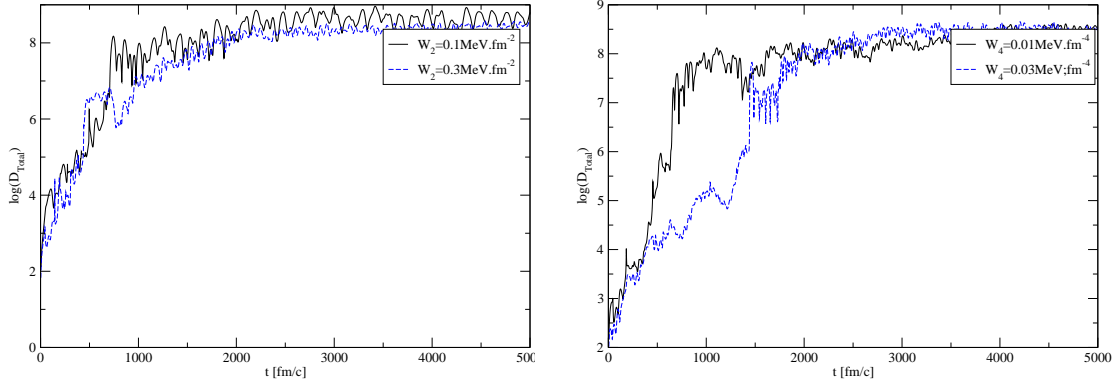


FIG. 6.13 – Représentation du logarithme des distances de Lyapunov pour un noyaux d'hélium 4 piégé dans un puit harmonique (figure de gauche), et pour un piège en  $\bar{r}^{-4}$  (figure de droite). Pour chacun des deux type de piège, deux valeurs ont été choisies pour les constantes de piège  $W_2$  et  $W_4$ . Dans tous les cas la croissance est linéaire, et sature à cause de la dimension finie de l'espace des phases. Ce résultat confirme l'écartement exponentiel de la distance de Lyapunov, et donc la chaotité du système. L'exposant de Lyapunov peut être estimé dans chacun des cas, à l'aide de la pente de la droite.

$W_2$ [MeV.fm $^{-2}$ ]	0.1	0.3
$\lambda$ [c/fm]	0.00476	0.00318
$\chi^2$	0.955	0.903

$W_4$ [MeV.fm $^{-4}$ ]	0.01	0.03
$\lambda$ [c/fm]	0.00652	0.00267
$\chi^2$	0.964	0.967

TAB. 6.1 – Ensemble des tableaux récapitulatifs regroupant l'ensemble des exposants de Lyapunov  $\bar{\lambda}$ . Ces derniers ont été extraits à l'aide des pentes des droites, qui ont été ajusté sur les données des figures (6.13). Les indices de confiances  $\chi^2$  sur l'ajustement, semblent donner un très bonne avec la croissance linéaire du logarithme de la distance de Lyapunov dans chacun des cas.

## 6.5 Etude thermodynamique d'un système finie : le noyau d'hélium 4.

Dans cette section nous étudions la thermodynamique d'un noyau d'hélium 4 confiné dans un piège en  $\vec{r}^4$ . Nous allons montrer que, même pour un système constitué seulement de 4 particules, une claire phénoménologie de transition de phase du premier ordre apparaît. La transition sera évaluée à l'aide de la courbe calorique qui donne la relation fonctionnelle entre la température et l'énergie. Avant de montrer les résultats, une dernière étape technique consiste à évaluer le temps d'autocorrelation pour la construction des moyennes statistiques.

### 6.5.1 Calcul de la fonction d'autocorrelation.

Lorsque l'ensemble du système fluide nucléaire plus thermomètre nucléaire a atteint l'équilibre thermodynamique, il est nécessaire de comptabiliser l'ensemble des événements qui vont nous permettre de déterminer la température ainsi que l'énergie d'excitation moyenne de notre système. Comme pour le modèle d'Ising, ils nous faut éliminer les corrélations spurieuses, et déterminer à partir de quel moment deux événements, c'est à dire deux réalisations temporelles différentes, peuvent être considérés comme indépendants. Le temps de décohérence va être déterminé à l'aide de la fonction d'autocorrélation normalisée, qui est définie par :

$$\begin{aligned} g(\tau) &= \frac{\langle \Theta(\tau)\Theta(0) \rangle}{\langle \Theta(0)^2 \rangle} \\ &= \frac{\int_0^\infty \Theta(t+\tau)\Theta(t)dt}{\int_0^\infty \Theta(t)^2 dt} \end{aligned} \quad (6.62)$$

où  $\Theta$  correspond à la valeur moyenne d'une des observables du système lorsque l'on a atteint l'équilibre thermodynamique, c'est à dire lorsque l'on a observé la convergence de toutes les observables. On choisira pour  $\Theta$  la valeur moyenne de l'énergie du fluide nucléaire. Dans le cas présent, le temps de décohérence  $\tau_D$  sera donné par le temps où l'on vérifiera la relation  $g(\tau_D) = \frac{g(0)}{2}$ . Comme pour le modèle d'Ising on devra estimer pour chaque énergie d'excitation du système, la valeur de  $\tau_D$  afin de déterminer correctement la moyenne ergodique de chacune des observables. La figure (6.14) illustre la fonction d'autocorrélation pour un noyaux d'hélium 4 plongé dans un piège en  $\vec{r}^4$ , où l'énergie d'excitation est de l'ordre de 4 MeV par nucléon. On peut remarquer que le temps de décohérence est assez long, même si le système est suffisamment excité. Ces temps sont généralement de l'ordre de 1500 fm/c pour des énergies d'excitations qui sont supérieures à 5 MeV par nucléon. Ces temps de décohérence assez longs, s'expliquent essentiellement par le fait que le système oscille à plusieurs fréquences qui sont très proches de celle du piège. Etant donné que nous aurons un nombre d'événements assez limité pour réaliser notre moyenne ergodique sur les différentes observables, il sera donc impératif d'estimer l'erreur sur ces dernières qui évoluera comme en  $\frac{1}{\sqrt{n_{\text{Total}}}}$ , où  $n_{\text{Total}}$  correspond au nombre total d'événements sélectionnés pour calculer les moyennes ergodiques.

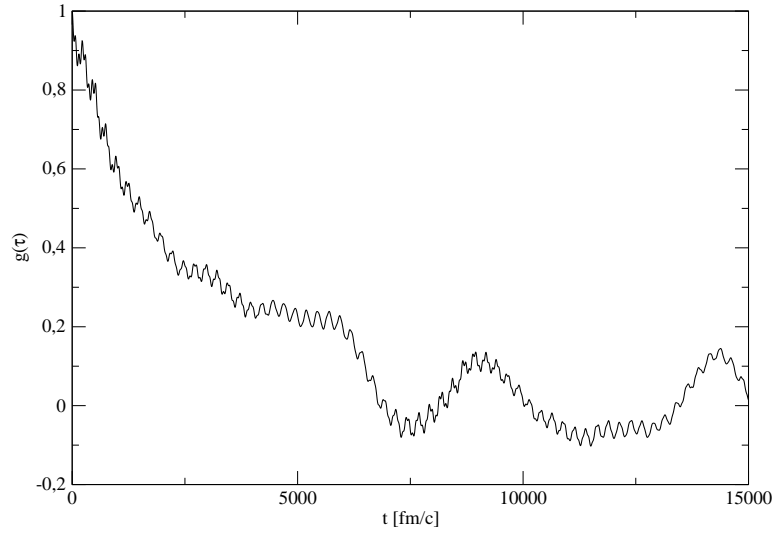


FIG. 6.14 – Fonction d'autocorrélation obtenue à partir de l'évolution temporelle de l'énergie du fluide nucléaire à l'équilibre thermodynamique. Le temps de décohérence est de l'ordre de 1500fm/c pour cet exemple, où l'énergie d'excitation est de  $E^* = 6.23\text{MeV/A}$ .

### 6.5.2 Courbes caloriques du noyau d'hélium 4.

Nous allons maintenant extraire la courbe calorique du noyau d'hélium 4 en utilisant la méthode développée précédemment. La constante du piège sera fixée à  $W_4 = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ , et nous utiliserons une interaction de contact entre le fluide nucléaire et le thermomètre avec  $\lambda = 6 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$ . Pour différentes énergies d'excitation du système, nous pouvons extraire les températures du système correspondantes, où les moyennes ergodiques sont estimées en tenant compte des temps de décohérence obtenus à l'aide de la fonction d'autocorrélation.

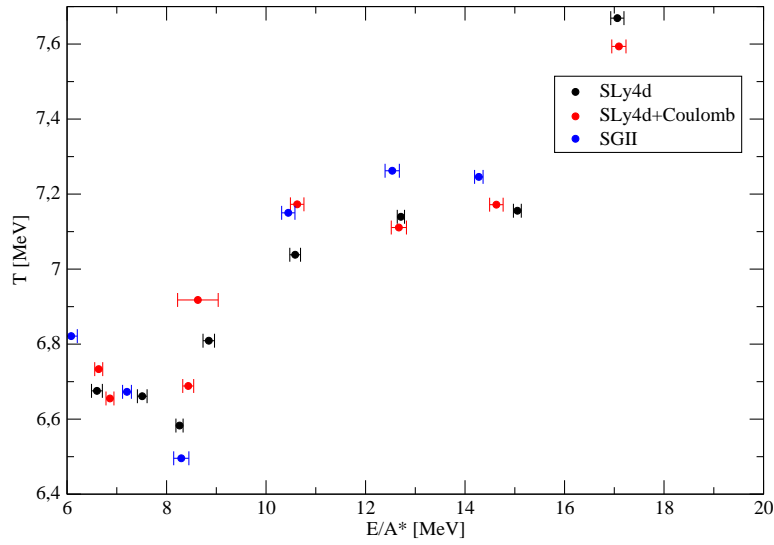


FIG. 6.15 – Courbes caloriques du noyau d'hélium 4 pour  $W_4 = 0.01 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ . Les points en noirs, rouges, et bleus représentent respectivement les calculs réalisés avec l'interaction SLy4d, SLy4d plus l'interaction Coulombienne, et l'interaction SGII. On remarque qu'il n'y pas de différence notable entre les trois calculs.

La figure (6.15) représente l'ensemble des trois calculs qui ont été réalisés, où l'ensemble des courbes caloriques a été calculé pour des énergies d'excitations comprises entre  $E^* = 6 \text{ MeV}/A$  et  $E^* = 17 \text{ MeV}/A$ . Les températures associées à des énergies d'excitations comprises entre  $E^* = 3 \text{ MeV}/A$  et  $E^* = 5 \text{ MeV}/A$  n'ont pas été extraites, car elles correspondent à des énergies du fluide nucléaire qui ne permettent pas de respecter la condition (6.11). Enfin pour les systèmes encore plus froids, il est plus difficile de thermaliser le système, c'est pourquoi nous n'avons pas exploré cette partie du diagramme des phases. Il faut également noter que les différentes courbes caloriques ont été extraites avec des valeurs moyennes pour  $\mathcal{H}_{\text{Nucéaire}}$  et  $\mathcal{H}_{\text{Th}}$  qui ont des ordres de grandeurs comparables, et ceci afin d'éviter tout problème de couplage entre les deux systèmes. On travaille donc dans un ensemble statistique hybride qui se situe entre l'ensemble micro-canonique et l'ensemble canonique. La première courbe calorique a été obtenue pour un système neutre en charge, et nous avons utilisé l'interaction de Skyrme SLy4d. Cette dernière peut être comparé à celle obtenue pour un système chargé, et nous pouvons remarquer que les effets Coulombiens ont une influence négligeable sur la courbe calorique. Ceci s'explique par le fait que l'énergie d'interaction Coulombienne ne représente qu'une très faible proportion



de l'énergie totale du noyau d'hélium 4. Afin de pouvoir tester les éventuelles effets de l'interaction Coulombienne sur le diagramme des phases, il faudrait pour cela prendre un système plus chargé, tel que par exemple le noyau d'oxygène 16. Si l'on regarde maintenant la courbe calorique obtenue avec l'interaction réaliste SGII, nous constatons que celle-ci peut être quasiment superposé à celle obtenue avec la paramétrisation SLy4d. Ce qui démontre que le diagramme des phases reste insensible à la paramétrisation utilisée. Il serait toute fois intéressant de comparer nos résultats, à une courbe calorique obtenue à l'aide d'une interaction moins réaliste tel que l'interaction SIII. La première partie décroissante entre  $6 < E^* < 8\text{MeV}$  est difficile à comprendre et pourrait refléter une persistance de problèmes numériques. Pour des énergie plus élevées, les courbes caloriques montrent un comportement d'inversion de pente caractéristique d'une transition de phase du premier ordre pour un système fini [148]. Ce résultat est en accord avec les études de thermodynamique FMD/AMD déjà réalisés dans la littérature [74, 149, 150].

Afin d'obtenir des informations supplémentaires sur la de transition de phase, nous avons regardé la distribution en énergie pour chacun des points calculés. Les figures (6.16), (6.17), (6.18), et (6.19) illustrent les distributions d'énergies pour quatre points de la courbe calorique du noyau d'hélium 4 neutre en charge. Ces dernières ont été obtenues pour des calculs statistiques comportant environ 80 événements. Si l'on part d'une énergie d'excitation du système qui est de l'ordre de  $E^* = 8\text{MeV/A}$ , on passe progressivement d'une distribution monomodale qui caractérise l'équivalence de la phase liquide, vers une distribution bimodale caractérisant la zone de coexistence liquide-gaz, pour enfin retrouver de nouveau une distribution monomodale traduisant la phase gaz du système.

Les figures (6.20), (6.21), (6.22), et (6.23) représentent les distributions d'énergie pour le noyau d'hélium 4 chargé. Comme précédemment, le système est caractérisé par une transition de type liquide-gaz. Néanmoins on peut remarquer que le système est caractérisé par un distribution trimodale pour l'énergie d'excitation  $E^* = 10.623\text{MeV/A}$ . Le système fluctue entre trois configurations possibles qui sont deutérium + deutérium, hélium 3 + neutron, et tritium + proton. Les configurations hélium 3 + neutron, et tritium + proton sont tout à fait équivalentes en l'absence d'interaction Coulombienne, ce qui explique pourquoi nous trouvons une distribution bimodale pour un système neutre en charge. L'apparition de la distribution trimodale est donc essentiellement due à la brisure de symétrie induite par l'interaction Coulombienne.

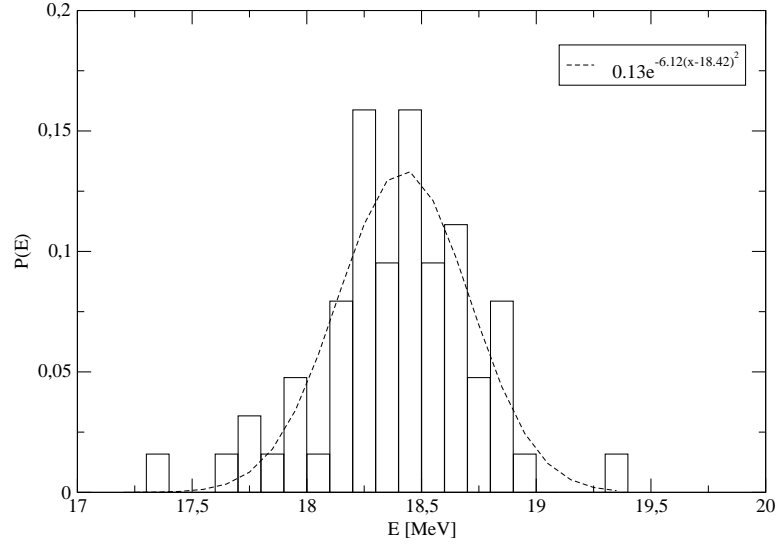


FIG. 6.16 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 neutre en charge pour  $E^* = 8.84 \text{ MeV/A}$ . La distribution est monomodale, ce qui caractérise la phase "liquide" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide d'une gaussienne, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.906$ .

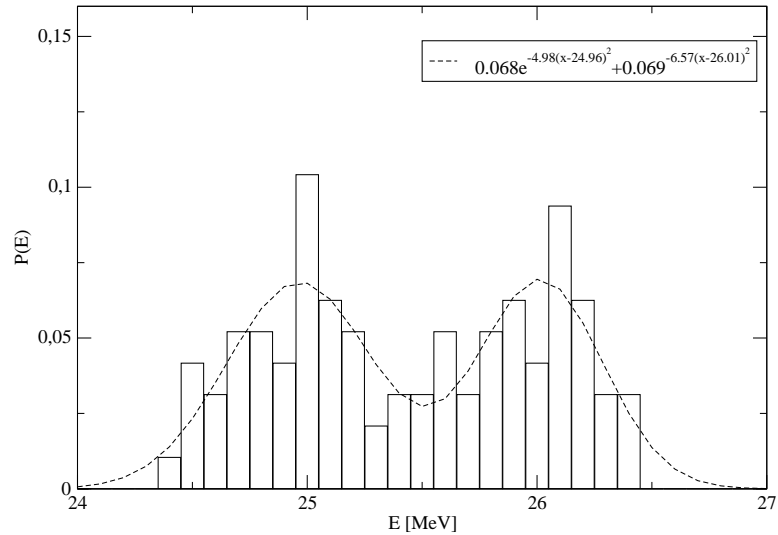


FIG. 6.17 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 neutre en charge pour  $E^* = 10.58 \text{ MeV/A}$ . La distribution est bimodale, ce qui caractérise la zone de coexistence "liquide-gaz" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide de deux gaussiennes, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.907$ .

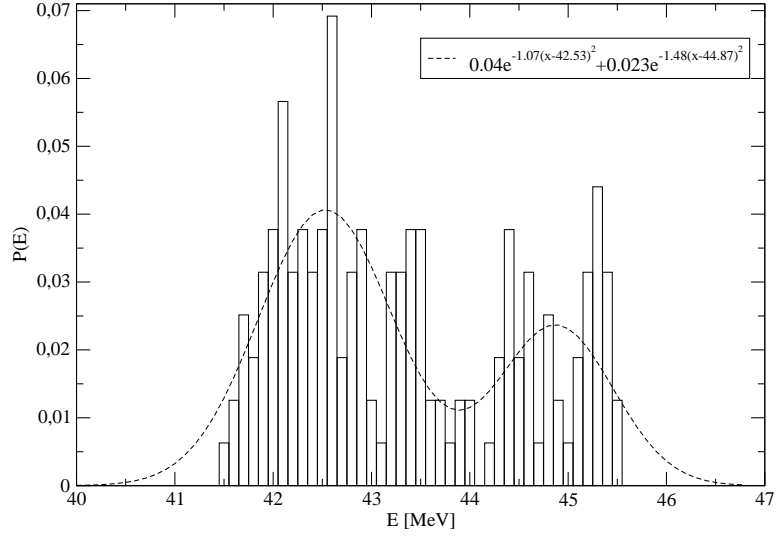


FIG. 6.18 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 neutre en charge pour  $E^* = 15.05 \text{ MeV/A}$ . La distribution est bimodale, ce qui caractérise la zone de coexistence "liquide-gaz" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide de deux gaussiennes, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.795$ .

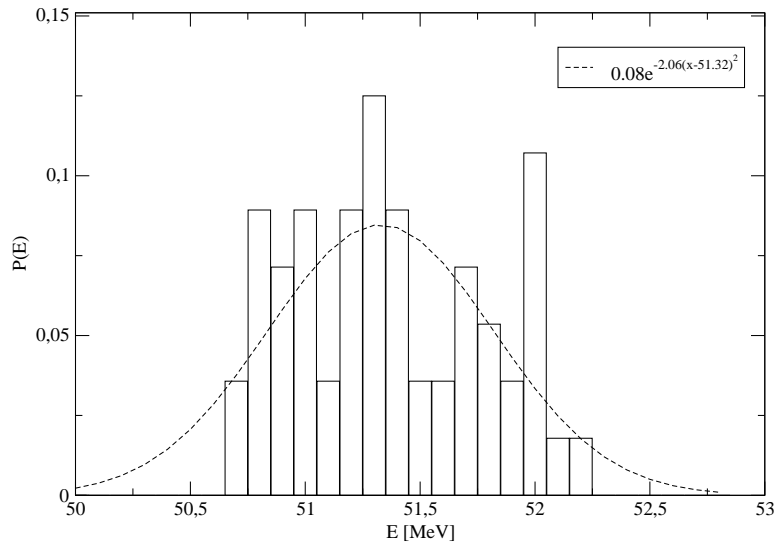


FIG. 6.19 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 neutre en charge pour  $E^* = 17.06 \text{ MeV/A}$ . La distribution est monomodale, ce qui caractérise la phase "gaz" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide d'une gaussienne, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.796$ .

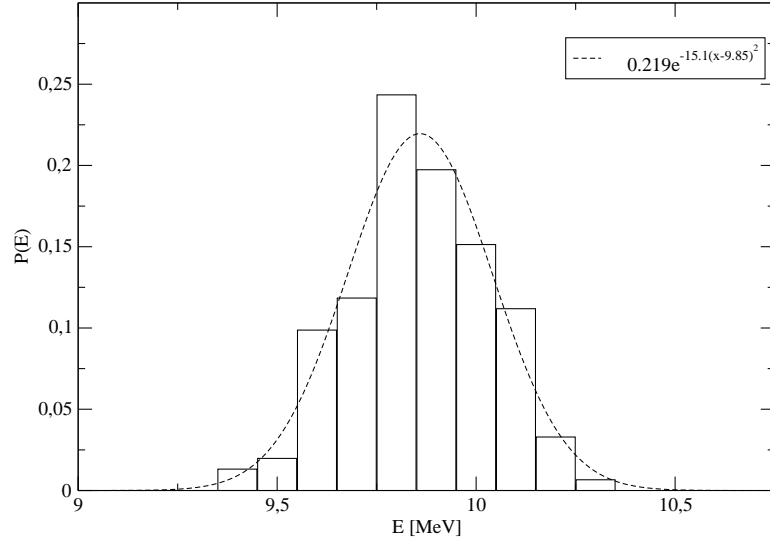


FIG. 6.20 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 chargé pour  $E^* = 6.63 \text{ MeV/A}$ . La distribution est monomodale, ce qui caractérise la phase "liquide" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide d'une gaussienne, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.98$ .

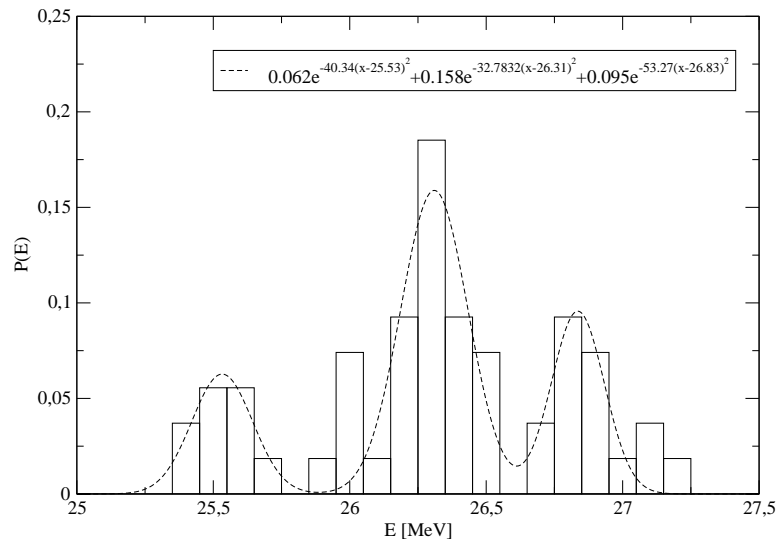


FIG. 6.21 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 chargé pour  $E^* = 10.62 \text{ MeV/A}$ . La distribution est bimodale, ce qui caractérise la fluctuation du système entre trois configurations possibles qui sont deutérium + deutérium, hélium 3 + neutron, et tritium + proton. Celle-ci peut être ajustée à l'aide de trois gaussiennes, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.912$ .

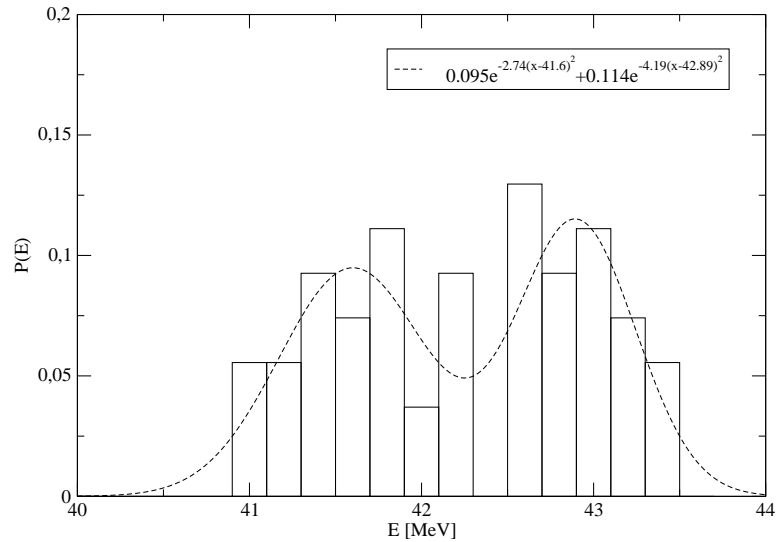


FIG. 6.22 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 chargé pour  $E^* = 14.63 \text{ MeV/A}$ . La distribution est bimodale, ce qui caractérise la zone de coexistence "liquide-gaz" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide de deux gaussiennes, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.851$ .

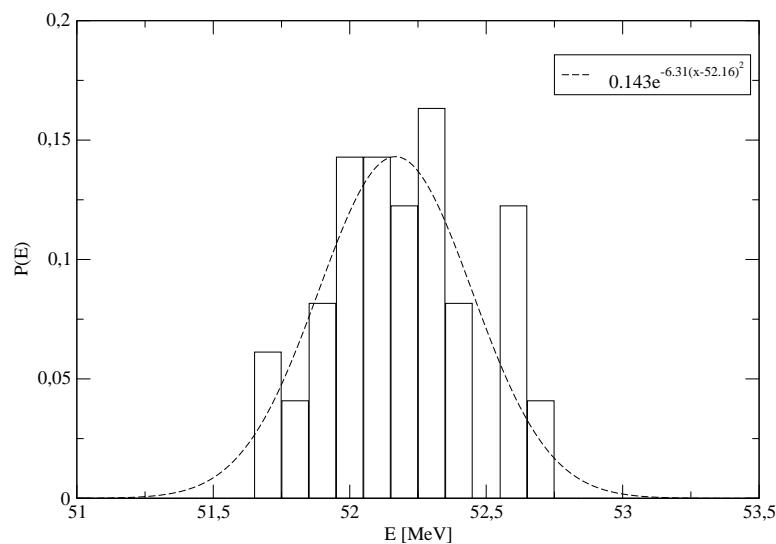


FIG. 6.23 – Distribution d'énergie du noyau d'hélium 4 chargé pour  $E^* = 17.63 \text{ MeV/A}$ . La distribution est monomodale, ce qui caractérise la phase "gaz" du système. Celle-ci peut être ajustée à l'aide d'une gaussienne, où l'indice de confiance sur l'ajustement est donné par  $\chi^2 = 0.905$ .

## 6.6 Conclusion.

Au cours de ce chapitre, nous avons développé une méthodologie permettant d'implémenter correctement un thermomètre utile à l'extraction du diagramme des phases des systèmes finis. Nous avons vu que ces derniers devaient être contenus dans un piège non linéaire, condition qui doit être également imposée pour le terme d'interaction de contact avec le thermomètre afin d'éviter tout problème de thermalisation. Nous avons également testé l'ergodicité du système avant d'effectuer tout calcul statistique en utilisant différentes méthodes, et nous avons vu que l'extraction du nombre de Lyapunov semble être la plus concluante. Le diagramme des phases pour le noyau d'hélium 4 montre qu'il est caractérisé par une transition de premier ordre avec coexistence entre différentes configurations, ce qui correspondrait à des phases dans un système infini. L'interaction Coulombienne influe sur celui-ci en brisant une symétrie du système, et en créant l'apparition d'une distribution multimodale pour une certaine partie de la zone de coexistence.

Nous pourrions donc par la suite utiliser la même méthodologie concernant l'extraction du diagramme des phases pour la matière d'étoile. Cette dernière étant une matière infinie où les particules n'ont pas besoin d'être contenues dans un piège, nous pouvons espérer que les effets de couplage du thermomètre avec de possibles modes collectifs du fluide nucléaire seront nettement réduits, et les calculs de thermodynamique plus aisés. Nous allons maintenant consacrer notre prochain chapitre à l'adaptation du modèle FMD à la matière d'étoile.



# Chapitre 7

## Perspectives : vers une application du modèle FMD à la matière d'étoile.

### 7.1 Introduction.

Le précédent chapitre était orienté vers l'étude du noyau fini d'hélium 4 contenu dans un piège dont les conditions aux bords du réseau utile à son étude étaient sans ambiguïtés. Si on cherche maintenant à réaliser un travail similaire pour la matière d'étoile, nous devons utiliser une cellule qui reproduit correctement un bloc de matière infinie. Comme nous l'avons vu dans les chapitres portant sur le problème de la matière d'étoile, l'usage d'une cellule périodique étendue à l'infini est nécessaire afin de reproduire le caractère infini de la matière d'étoile.

Ce type de problème est tout à fait analogue à ceux que l'on rencontre en physique de l'état solide pour les structures cristallines de certains matériaux. Il faut néanmoins distinguer le cas de la matière d'étoile du cas des solides où le système est aussi infini et périodique. Pour le cas des solides, la structure est périodique car le potentiel ionique est périodique. Inversement pour l'écorce des étoiles à température nulle, le potentiel auto-cohérent dans lequel les particules sont plongées est périodique, car la structure est périodique à cause des symétries. A température finie les symétries sont brisées et le système n'est plus périodique. Toutefois du point de vue strictement technique, la seule façon de minimiser les effets spurieux de taille finie (dus au fait que les simulations ne peuvent se faire que sur des systèmes finis) est de répliquer le système dans les trois directions de l'espace, ce qui par construction produit un système périodique [39]. Il faut donc garder à l'esprit que la périodicité imposée contrairement au cas des solides, n'est qu'une approximation, et il faudra donc veiller à vérifier que le système étudié est de dimension linéaire supérieur à la longueur de corrélation  $\lambda(T)$ . Par exemple si le système était critique à la température  $T = T_C$ , la représentation du système périodique serait tout simplement inadéquate.

Si l'on cherche à résoudre le problème quantique pour un système périodique, aussi bien pour le cas des étoiles que pour le cas des solides, c'est à dire pour un système présentant un potentiel périodique, la structure discrète du spectre en énergie d'une cellule isolée, prend une structure en bandes à cause de la périodicité du potentiel [151]. La solution pour la fonction d'onde totale du système est une fonction d'onde de Bloch [151]. Ces ingrédients de mécanique quantique n'ont pas été pris en compte pour l'ensemble des calculs qui ont été réalisés par C.J. Horowitz et G. Watanabe [8, 18, 19], et seule la condition sur les



bords périodique d'une cellule a été imposée. Ce qui est une condition nécessaire, mais pas suffisante si l'on souhaite traiter le problème quantique. A l'heure actuelle, seul le calcul de l'énergie d'interaction Coulombienne utilise la propriété de périodicité d'une cellule pour le contexte astrophysique. Une partie importante de la physique du problème a donc été oubliée, et il est possible que la structure en bandes du spectre en énergie joue un rôle important sur l'estimation quantitative des différentes observables qui peuvent être calculées, ainsi que sur les différentes structures que peut prendre la matière d'étoile à très basse température. Une indication en ce sens vient des calculs de N. Chamel *et al.* [152] qui ont montré dans le cadre d'une approche HFB, que la prise en compte des phases de Bloch influence le calcul de la superfluidité de l'écorce. Le but de ce chapitre est de proposer un formalisme basé sur les fonctions d'onde de Bloch adapté à l'implémentation du concept de matière périodique dans une approche FMD. Dans la première sous-partie de ce chapitre, nous définirons les fonctions d'onde de Bloch pour différents ensembles statistiques. Nous discuterons ensuite son implémentation dans le cadre du modèle FMD. Nous terminerons enfin ce chapitre, en proposant une technique permettant d'implémenter l'interaction Coulombienne pour le contexte astrophysique dans le cadre du modèle FMD.

## 7.2 Implémentation des conditions de Bloch.

### 7.2.1 Formalisme de base et ensembles statistiques.

Le but de cette sous-partie est de présenter la forme générale des fonctions d'onde d'un système de particules indépendantes soumises à un potentiel périodique [151]. La conséquence directe sera l'apparition d'une structure en bandes pour le spectre en énergie de particule seule, structure qui devra être considérée pour tous les calculs statistiques réalisés par la suite à l'aide du modèle FMD. Dans la suite de l'exposé nous ne considérerons que l'espace à une dimension afin de simplifier les notations, et le cas d'école d'un potentiel externe  $U(\hat{x})$ . L'ensemble des résultats pourra être généralisé aisément à l'espace à trois dimensions, et au cas physique d'intérêt d'un potentiel auto-cohérent  $U(\rho(\hat{x}))$ . Le Hamiltonien par particule est donné par :

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\rho(\hat{x})) \quad (7.1)$$

et l'équation aux valeurs propres pour un système non-périodique s'écrit :

$$\hat{h}|\psi_n\rangle = \varepsilon_n|\psi_n\rangle \quad (7.2)$$

avec  $|\psi_n\rangle$  qui sont des états propres orthonormés à une particule,  $\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle = \delta_{n'n}$ . Si l'on considère  $2N$  répliques du système physique, c'est à dire pour un potentiel respectant la relation  $U(x) = U(x + mL)$  avec  $m = -N, \dots, 0, \dots, N$ , le théorème de Bloch [151] donne une équation aux valeurs propres plus généralisée comme suit :

$$\hat{h}|\psi_{n,k}\rangle = \varepsilon_{n,k}|\psi_{n,k}\rangle \quad (7.3)$$

avec  $\langle\psi_{n',k'}|\psi_{n,k}\rangle = \delta_{n'n}\delta_{k'k}$ , où  $k = -N, \dots, 0, \dots, N$  est le nombre d'onde associé aux états à une particule, dont la projection dans la représentation  $|x\rangle$  respecte la condition de périodicité d'une cellule selon :

$$\langle x|\psi_{n,k}\rangle = u_{n,k}(x)e^{i\frac{2\pi k}{(2N+1)L}x} \quad (7.4)$$

où  $L$  est la périodicité imposée sur la fonction d'onde. Pour un système périodique infini c'est à dire pour  $N \rightarrow \infty$ , le même nombre quantique  $n$  est associé à un nombre infini d'états propres qui diffèrent entre eux par un facteur de phase :

$$\langle x | \psi_{n,\varphi} \rangle = u_{n,\varphi}(x) e^{i\varphi x} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{2\pi}{L} \quad (7.5)$$

Cette fonction d'onde est appelée fonction d'onde de Bloch. Elle est caractérisée par le fait d'avoir, à côté du nombre quantique  $n$ , un nombre quantique additionnel  $k$  provenant de l'invariance translationnelle du problème. Cette invariance translationnelle impose la condition de périodicité  $u_{n,k}(x) = u_{n,k}(x + mL)$  de telle sorte que la fonction d'onde est périodique à moins d'un facteur de phase :

$$\langle x + mL | \psi_{n,k} \rangle = e^{i \frac{2\pi k}{2N+1} m} \langle x | \psi_{n,k} \rangle \quad (7.6)$$

La fonction d'onde de Bloch  $\psi_{n,k}(x)$  représente physiquement une particule délocalisée sur  $2N+1$  cellules identiques, ce qui a pour effet de transformer l'état propre dans une bande. En effet si l'on considère des ondes de Bloch pour les états à une particule, l'équation aux valeurs propres (7.3) se réduit à résoudre dans la représentation  $|x\rangle$  l'équation différentielle pour  $u_{n,k}(x)$  donnée par :

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -i\nabla + \frac{2\pi k}{(2N+1)L} \right)^2 + U(x) \right] u_{n,k}(x) = \varepsilon_{n,k} u_{n,k}(x) \quad (7.7)$$

où l'on peut voir que  $n$  donne le nombre de chaque bande et  $k = -N, \dots, 0, \dots, N$  le niveau à l'intérieur de chaque bande. Les énergies propres solutions de cette équation différentielle sont schématiquement représentées par la figure (7.1). Celle-ci nous montre

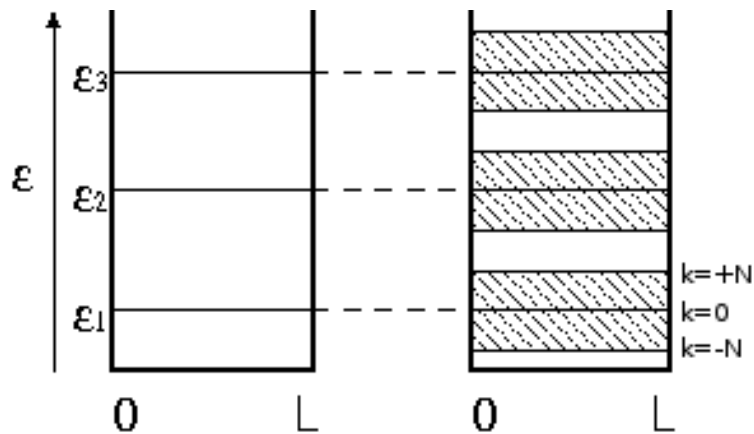


FIG. 7.1 – Figure représentant le spectre en énergie pour un système isolé (à gauche), et celui d'un système périodique (à droite). Les niveaux d'énergie tendent à former des bandes d'énergie lorsque l'on fait tendre  $N \rightarrow \infty$ .

que les énergies propres sont discrètes, que de nouveaux niveaux d'énergie apparaissent lorsque l'on augmente progressivement le nombre de répliques du système physique, et qui tendent à former des bandes d'énergie lorsque l'on fait tendre  $N \rightarrow \infty$ . La fonction d'onde

de Bloch  $\psi_{n,k}(x)$  est définie sur tout l'espace  $-NL \leq x \leq NL$ . Tout calcul d'observable  $\hat{\Theta}$  sur un état de Bloch :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Theta} \rangle &= \langle \psi_{n,k} | \hat{\Theta} | \psi_{n,k} \rangle \\ &= \int_{-NL/2}^{NL/2} \int_{-NL/2}^{NL/2} \psi_{n,k}^*(x') \Theta(x, x') \psi_{n,k}(x) dx dx' \end{aligned} \quad (7.8)$$

comporte donc une intégrale sur un espace infini, ce qui est impossible à réaliser. La même chose est naturellement vraie pour le cas de plusieurs particules : si  $\hat{\Theta}$  est un opérateur à un corps et les particules sont indépendantes alors :

$$\langle \hat{\Theta} \rangle = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \langle \psi_{n_i, k_i} | \hat{\Theta} | \psi_{n_i, k_i} \rangle \quad (7.9)$$

où nous avons supposé des états orthogonaux. Toutefois ceci peut se simplifier : l'avantage du formalisme de Bloch est que nous pouvons obtenir les résultats du système infini, tout en travaillant sur une seule cellule  $0 \leq x \leq L$ . A ce but définissons la fonction d'onde dans la cellule :

$$\bar{\psi}_{n,k}(x) = \sqrt{2N+1} \psi_{n,k}(x) \quad \text{avec } 0 \leq x \leq L \quad (7.10)$$

définie de façon à avoir la juste normalisation, c'est à dire telle que la valeur moyenne d'un opérateur local à un corps soit :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Theta}_l \rangle &= (2N+1) \langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}} \\ &= \frac{2N+1}{A} \sum_{i=1}^A \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n_i, k_i}^*(x) \Theta(x) \psi_{n_i, k_i}(x) dx \end{aligned} \quad (7.11)$$

Le cas des opérateurs non locaux comme l'énergie cinétique est plus délicat, et ne sera pas abordé ici. Cette expression montre que les observables locales sont extensives (proportionnelles à  $(2N+1)$ ). Dans une longueur finie  $L$ , les observables du système infini se calculent donc à l'aide d'une cellule :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}} &= \frac{\langle \hat{\Theta}_l \rangle}{2N+1} \\ &= \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n_i, k_i}^*(x) \Theta(x) \psi_{n_i, k_i}(x) dx \end{aligned} \quad (7.12)$$

Si le système est à température finie, et ceci est le cas qui nous intéresse, les états de particule seul  $\psi(x)$  ne sont pas les états purs, mais des états mélange :

$$\psi(x) = \sum_{n,k} p_{n,k} \psi_{n,k}(x) \quad (7.13)$$

avec  $p_{n,k}$  la probabilité de l'état  $|\psi_{n,k}\rangle$ . A la limite thermodynamique la phase  $k$  devient une variable continue, et cette équation devient :

$$\psi(x) = \sum_n \int_0^{2\pi/L} d\varphi p_{n,\varphi} \psi_{n,\varphi}(x) \quad \text{avec } 0 \leq \varphi \leq \frac{2\pi}{L} \quad (7.14)$$

La valeur moyenne à température finie s'écrit donc :

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}} = \sum_n \int_0^{2\pi/L} d\varphi p_{n,\varphi} \langle \hat{\Theta}_l \rangle_{n,\varphi} \quad (7.15)$$

où

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle_{n,\varphi} = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n,\varphi}^*(x) \Theta(x) \psi_{n,\varphi}(x) dx \quad (7.16)$$

Dans l'ensemble grand-canonique,  $p_{n,\varphi}$  est analytique :

$$p_{n,\varphi} = \frac{1}{1 + \exp(\beta(\varepsilon_{n,\varphi} - \mu))} \quad (7.17)$$

Pour une application à FMD, nous nous intéressons à l'ensemble micro-canonique et nous accédons aux probabilités des micro-états en utilisant le théorème ergodique :

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \sum_n \int_0^{2\pi/L} d\varphi p_{n,\varphi}(t) \langle \hat{\Theta}_l \rangle_{n,\varphi} \quad (7.18)$$

où

$$p_{n,\varphi}(t) = \delta(n - n(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \quad (7.19)$$

est la fréquence d'occupation des micro-états donnée par la dynamique supposée ergodique.

La prochaine sous-partie va être consacrée à l'application du formalisme des ondes de Bloch que nous venons de développer, dans le cadre du modèle FMD pour l'ensemble micro-canonique.

### 7.2.2 Implémentation dans le cadre du modèle FMD.

Dans la précédente sous-partie nous avons vu que si nous voulons traiter correctement le problème quantique pour la matière d'étoile dans l'approximation de particules indépendantes, les états à une particule devront être des fonctions d'onde de Bloch. Avec l'ansatz FMD pour les fonctions d'onde (4.15), ceci revient à écrire :

$$\langle x | q_{l,k}(t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2N+1)^{1/2}} \sum_{m=-N}^N \exp \left( -\frac{(x - b_l(t) - mL)^2}{2a_l(t)} \right) e^{i \frac{x}{L} k \frac{2\pi}{2N+1}} |\chi_l(t), \phi_l(t)\rangle |m_t(l)\rangle \quad (7.20)$$

où les indices  $l$  et  $k$  indiquent qu'il s'agit de la  $l$ ème particule à laquelle nous lui avons associé l'onde  $k$ . Chaque état à une particule représente donc l'évolution dynamique de  $2N+1$  particules délocalisées sur les  $2N+1$  cellules. Nous avons vu au paragraphe précédent que nous serons menés à calculer des intégrales seulement dans la cellule  $0 \leq x \leq L$ . Si nous avons le soin de choisir la condition  $L \gg a_l(t) \forall l$ , alors à tout fin de calcul, la fonction d'onde définie par l'équation (7.10) pourra être remplacée par :

$$\langle x | \bar{q}_{l,\varphi_l}(t) \rangle = \sum_{m=-1}^1 \exp \left( -\frac{(x - b_l(t) - mL)^2}{2a_l(t)} \right) e^{i\varphi_l x} |\chi_l(t), \phi_l(t)\rangle |m_t(l)\rangle \quad (7.21)$$

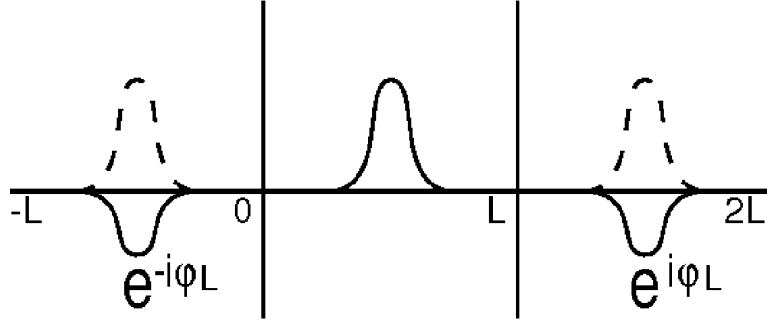


FIG. 7.2 – Représentation de la partie réelle de l'état à une particule défini par la relation (7.21). La gaussienne est répliquée dans chacune des cellules en tenant compte du facteur de phase  $\varphi$ .

si  $0 \leq x \leq L$  avec  $0 \leq \varphi \leq 2\pi/L$ . Ceci est représenté par la figure (7.2). Cette fonction d'onde représente pour chaque choix de phase une particule dans une cellule, ce qui est équivalent à avoir  $2N + 1$  particules dans  $2N + 1$  cellules. La moyenne statistique définie par l'équation (7.22) s'écrit :

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}}(t) \quad (7.22)$$

où la moyenne instantanée est donnée par :

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle_{\text{Box}}(t) = \frac{1}{A} \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle \bar{q}_{k,\varphi_k}(t) | \hat{\Theta}_l | \bar{q}_{l,\varphi_l}(t) \rangle O_{l\varphi_l, k\varphi_k}(t) \quad (7.23)$$

En utilisant la relation (7.21), le recouvrement entre deux états à une particule s'écrit donc :

$$\begin{aligned} O_{j\varphi_j, i\varphi_i}^{-1} &= \langle q_{j,\varphi_j} | q_{i,\varphi_i} \rangle_{\text{Box}} \delta_{\varphi_j, \varphi_i} \\ &= \left( 2\pi \frac{a_j^* a_i}{a_j^* + a_i} \right)^{1/2} \langle \chi_j, \phi_j | \chi_i, \phi_i \rangle \langle m_t(j) | m_t(i) \rangle \times \\ &\quad \left[ \exp \left( -\frac{(b_j^* - b_i)^2}{2(a_j^* + a_i)} \right) + \exp \left( -\frac{(b_j^* - b_i - L)^2}{2(a_j^* + a_i)} \right) + \exp \left( -\frac{(b_j^* - b_i + L)^2}{2(a_j^* + a_i)} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.24)$$

L'équation (7.22) suppose que, à cause de l'ergodicité de la dynamique, au cours du temps tous les états  $(l, \varphi_l)$  soient explorés de façon uniforme compatiblement avec la conservation de l'énergie. Ceci est vrai en ce qui concerne les paramètres variationnels des gaussiennes, mais non pour les phases de Bloch qui ne sont pas des variables dynamiques. La moyenne statistique doit donc se calculer en introduisant une ultérieure moyenne sur les phases :

$$\langle \hat{\Theta}_l \rangle = \frac{L^2}{4\pi^2} \int_0^{2\pi/L} d\varphi \int_0^{2\pi/L} d\varphi' \frac{1}{A} \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle \bar{q}_{k,\varphi} | \hat{\Theta}_l | \bar{q}_{l,\varphi'} \rangle_{\text{Box}} O_{l\varphi', k\varphi} \delta_{\varphi', \varphi} \quad (7.25)$$

Une des méthodes possibles afin de réaliser cette moyenne sur les phases est de changer de manière aléatoire la phase des particules, lorsque l'une d'entre elles sort de la cellule pour être replacée à l'autre extrémité de cette dernière selon les conditions aux bords périodiques. On explorera ainsi toutes les configurations accessibles au système. Le fait de changer de manière aléatoire la phase de la fonction d'onde du système a pour avantage d'introduire un mouvement stochastique, et donc d'avoir un calcul qui va au-delà du champ moyen. De plus étant donné qu'il s'agit d'un bloc de matière infini, les particules n'ont pas besoin d'être contenues dans un piège, ce qui implique que les effets de couplage du thermomètre avec de possibles modes collectifs du fluide nucléaire seront nettement réduits par rapport aux observations présentées au chapitre précédent. Pour ces raisons, nous nous attendons à ce que le temps de thermalisation et les propriétés ergodiques du système posent moins de problèmes pour la matière d'étoile.

Nous allons maintenant passer à la sous-partie qui traite de l'implémentation de l'interaction Coulombienne pour notre contexte astrophysique.

### 7.3 Implémentation de l'interaction Coulombienne pour la matière d'étoile.

Comme nous l'avons vu avec l'approche Ising-Star, l'implémentation de l'interaction Coulombienne pour le contexte astrophysique nécessite de tenir compte de la longue portée de l'interaction Coulombienne, tout en calculant toutes les interactions possibles proton-proton, electron-proton, et electron-electron. L'une des possibilités est d'utiliser un réseau périodique et d'appliquer la méthode de sommation d'Ewald pour le modèle FMD. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle demande l'évaluation directe de l'interaction Coulombienne avec l'utilisation de l'opérateur densité à deux corps, ce que nous cherchons absolument à éviter pour les raisons évoquées dans les chapitres précédents. Par contre il est tout à fait possible de calculer l'énergie Coulombienne comme nous l'avons fait pour le cas des noyaux finis, c'est à dire en résolvant l'équation de Poisson. Comme nous l'avons pu le voir, il s'agit d'une méthode simple à mettre en oeuvre, pour laquelle nous devons poser correctement les conditions aux limites adaptées au contexte astrophysique. Sachant que le système est constitué de protons dont la charge est écrantée par un fond uniforme d'électrons répartis uniformément sur le réseau, nous aurons une charge totale qui sera globalement nulle, et qui constituera la première condition aux limites à imposer lors de la résolution de l'équation de Poisson par :

$$\int \rho_c(\vec{r}) d^3\vec{r} = 0 \quad (7.26)$$

Ici la densité de charge total  $\rho_c$  est définie comme la somme de la densité de charge protonique et électronique  $\rho_c(\vec{r}) = \rho_p(\vec{r}) + \rho_e(\vec{r})$ , où l'on imposera  $\rho_p(\vec{r}) = - \int \rho_e(\vec{r}) / V d^3\vec{r}$  de telle sorte à respecter la condition de neutralité en charge globale de la matière d'étoile. Etant donné que nous travaillons dans un système périodique, la condition de périodicité sur le potentiel devra être également imposée comme étant la seconde condition aux limites lors de la résolution de l'équation de Poisson, se qui rejoint notre discussion de la précédente sous-partie. Explicitement :

$$V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = V_{\text{Coul}}(\vec{r} + \vec{L}) \quad (7.27)$$

Si l'on cherche à résoudre l'équation de Poisson à l'aide du schéma d'ordre 2 pour un réseau à une dimension, tout en respectant les conditions limites données par les relations (7.26) et (7.27), on obtient un système d'équations linéaires très similaire à celui qui a été obtenu pour les noyaux finis :

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

où nous avons conservé les mêmes notations que celles qui ont été définies dans le chapitre 5, et le système peut être toujours réécrit sous la forme transparente suivante :

$$C\vec{v} = \vec{f} \quad (7.29)$$

On peut remarquer que la matrice  $C$  présente à ces extrémités des constantes  $C_{1n} = C_{n1} = 1$ , qui nous n'avons pas pour le cas des noyaux finis et qui retraduisent la condition limite (7.27). Ce fait implique :

$$\sum_{j=1}^n C_{ij} = 0 \quad \forall i \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^n C_{ij} = 0 \quad \forall j \quad (7.30)$$

ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n f_i &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{ij} v_j \\ &= \sum_{j=1}^n v_j \sum_{i=1}^n C_{ij} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (7.31)$$

qui n'est rien d'autre que la condition de neutralité (7.26). Cette observation intéressante signifie que tout système infini doit nécessairement être neutre en charge pour éviter la divergence de l'énergie Coulombienne à la limite thermodynamique [40].

Si l'on cherche à résoudre l'équation (7.29), il semblerait que cette dernière pose problème. En effet la matrice  $C$  présente un noyau non nul où  $\det(C) = 0$ , elle est donc non inversible. Ceci peut mieux se voir en réécrivant l'équation de Poisson dans l'espace de Fourier :

$$\tilde{v}_k \propto \frac{\tilde{\rho}_{c,k}}{k^2} \quad (7.32)$$

et qui présente une divergence pour le mode  $k=0$ . Mais on peut remarquer que pour ce mode, la transformée de Fourier de la densité  $\tilde{\rho}_{c,k=0} = \int \rho_c(\vec{r}) d^3\vec{r}$  est nulle à cause de la neutralité en charge globale du système, ce qui implique donc que  $\tilde{v}_0$  est une constante arbitraire qui fixe seulement le niveau d'énergie du potentiel. On pourrait donc en principe résoudre l'équation de Poisson en supprimant le mode  $k=0$ . Cela aurait pour conséquence

d'estimer le potentiel à une constante près, ce qui est toujours le cas et qui n'a aucune influence lors du calcul direct de l'énergie Coulombienne donné par l'équation (5.12). Nous venons de voir à nouveau que les systèmes infinis doivent être neutres. Nous n'utiliserons pas cette méthode, mais les schémas d'intégration d'ordre 2 ou d'ordre 4, que nous avons précédemment utilisé pour les noyaux finis, mais en respectant cette fois les conditions limites (7.26) et (7.27). En appliquant ces schémas, on peut calculer le potentiel coulombien pour la matière d'étoile, ainsi que le terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne donné par les relations (5.12) et (5.13). Le tableau (7.1) est un exemple d'application numérique pour un réseau comprenant deux protons placés aléatoirement et écrantés par un fond uniforme d'électrons. Pour les deux schémas d'intégration, on remarque que le calcul converge très rapidement avec la méthode d'ordre 2, et que la précision tend à être meilleure pour la méthode d'ordre 4.

Nous avons ainsi développé une méthode très stable numériquement, et plus simple à implémenter que la méthode de sommation d'Ewald. Elle présente l'avantage d'être plus rapide que cette dernière, car nous n'utilisons que l'opérateur densité à un corps. La seule approximation qui est réalisée réside dans le calcul du terme d'échange, qui est calculé à l'aide de l'approximation de Slater.

	2nd order	4th order
$E_1$ (MeV)	0.06133	0.06108
$E_2$ (MeV)	0.06057	0.06106
erreur relative (%)	1.24	0.029

TAB. 7.1 – Estimation du terme direct de l'énergie d'interaction Coulombienne pour la matière d'étoile, à l'aide des méthodes itératives d'ordre 2 et d'ordre 4. Pour deux protons placés aléatoirement dans la cellule et écrantés par un fond uniforme d'électrons, on calcule les deux estimations différentes pour l'énergie Coulombienne  $E_1$  et  $E_2$  données par les relations (5.12), et (5.13). En respectant les conditions aux limites (7.26) et (7.27), on remarque que l'on obtient une très bonne convergence du terme direct avec les deux schémas d'intégration, dont la précision augmente avec l'ordre de la méthode.

## 7.4 Conclusions.

Nous avons donné dans ce chapitre des perspectives concernant l'implémentation de fonctions d'ondes de Bloch au sein de notre modèle, afin de reproduire le caractère infini de la matière d'étoile. Il faut néanmoins remarquer qu'aucune application numérique n'a été encore réalisée à l'aide du modèle FMD, et que certains points restent encore à approfondir avant de réaliser des simulations numériques.

En ce qui concerne l'implémentation de l'interaction Coulombienne pour le contexte astrophysique, nous avons vu que la résolution de l'équation de Poisson était une méthode originale permettant une résolution complète du problème concernant ce détail technique. En effet, elle permet une implémentation simple à mettre en oeuvre, et qui permet à la fois d'obtenir des résultats d'une très bonne précision à l'aide du schéma d'intégration d'ordre 4.





## Chapitre 8

### Conclusions et perspectives.

Nous avons lors de ce travail étudié les aspects thermodynamiques de la matière d'étoile à l'aide d'une approche Ising. Nous nous sommes intéressés aux effets de la frustration Coulombienne, et nous avons démontré qu'ils induisaient un élargissement de la zone de coexistence liquide-gaz avec une augmentation de la température limite pour le point de transition, résultat qui est entièrement dû à l'écrantage des électrons. Nous avons également démontré que le modèle Ising-Star n'appartient à aucune classe d'universalité car il n'admet pas de point critique. Ce résultat a été confirmé à l'aide du groupe de renormalisation. Cette suppression de la criticité n'appuie pas l'hypothèse d'un piégeage complet des neutrinos dans l'écorce des proto-étoiles à neutrons lors de la première étape de leur refroidissement. Néanmoins nous pouvons supposer que si la polarisabilité n'est pas négligeable, le potentiel d'interaction Coulombienne devra tenir compte d'un terme d'écrantage, et par conséquent l'interaction Coulombienne pourrait se comporter comme une interaction de portée finie. En plus si la matière d'étoile ne présente pas de point critique, elle devrait néanmoins présenter des transitions de premier ordre associées à des instabilités, qui peuvent avoir une influence importante sur les propriétés d'interaction des neutrinos avec la matière.

Dans le but d'obtenir des résultats réalistes pour les lignes de transition du premier ordre, nous avons développé un modèle FMD dont les équations ont été re-dérivées dans un formalisme Skyrme Hartree-Fock. L'implémentation numérique de notre modèle a été testée à de nombreuses reprises à l'aide de cas modèles, tel que le système constitué de fermions libres, où celui de fermions contenus dans un puit harmonique. Nous l'avons par la suite appliqué à l'étude des états fondamentaux de noyaux bien connus, et nous en avons constaté qu'il donnait des résultats en bon accord aussi bien avec le modèle Hartree-Fock, qu'avec les résultats expérimentaux. Son application à l'étude des modes collectifs des noyaux semble être très encourageante, et nous avons particulièrement obtenu des résultats quantitativement proches de l'expérience pour le cas de l'ISGMR du carbone 12. Néanmoins les calculs de modes collectifs à l'aide du modèle FMD restent raisonnables dans la limite où ils n'impliquent pas de compression. Le calcul d'IVGDR est l'une des perspectives envisagée pour la suite.

Notre motivation principale étant d'extraire les caractéristiques thermodynamiques des écorces des proto-étoiles, et étoiles à neutrons, nous avons commencé par un cas plus simple qui était celui de l'étude thermodynamique des noyaux finis. Nous avons exposé une méthodologie permettant l'implémentation d'un thermomètre nucléaire, et nous en avons conclu que ce dernier devait être couplé au fluide nucléaire par l'intermédiaire d'une interaction non-linéaire. L'ajout d'un piège non-linéaire confinant le fluide nucléaire est une condition nécessaire à la précédente afin d'éviter tout problème de thermalisation du

système. Après avoir effectué des tests de chaoticités permettant de valider l'ergodicité du système nucléaire, nous en avons extrait la courbe calorique du noyau d'hélium 4. Nous en avons déduit que ce dernier était caractérisé par une transition de type liquide-gaz, et que les paramétrisations de Skyrme utilisées n'avaient aucune influence sur le diagramme des phases. Il serait néanmoins intéressant de refaire le même type de calcul à l'aide d'une interaction moins réaliste tel que l'interaction SIII afin de tester son influence sur ce dernier. L'énergie d'interaction Coulombienne étant faible pour le cas du noyau d'hélium 4, il serait également utile de refaire les mêmes calculs pour des noyaux présentant une charge plus importante.

En utilisant les mêmes concepts développés pour le cas des noyaux finis, nous avons esquissé les méthodes qui permettent d'étudier les propriétés thermodynamique de la matière d'étoile. Cette dernière étant une matière infinie, les nucléons du système n'ont pas le besoin d'être piégés. On s'attend donc à ce que les effets de couplage du thermomètre avec de possibles modes collectifs du fluide nucléaire soient réduits, ce qui induira moins de problèmes en ce qui concerne le temps de thermalisation et les propriétés ergodiques du système. Néanmoins notre modèle FMD doit être adapté au contexte astrophysique, et nous avons vu qu'il doit pour cela être agrémenté de deux ingrédients essentiels. L'implémentation de l'interaction Coulombienne pour ce contexte peut se faire aisément en résolvant l'équation de Poisson. Les conditions de Bloch doivent être également implémentées afin de reproduire la propriété de matière infinie. Ce dernier point est actuellement encore en discussion bien que nous en avons exposé les principaux fondements de base. Une fois les conditions de Bloch implémentées nous devrions en principe pouvoir obtenir des premières informations sur la thermodynamique de la matière d'étoile. Nous pourrions ainsi par la suite calculer les sections efficaces d'interaction des neutrinos avec la matière d'étoile présente dans l'écorce interne des protoétoiles.

## Annexe A

### Elements de matrices et densités locales du modèle FMD.

#### A.1 Etat à une particule et ses dérivées premières dans la représentation $|\vec{r}\rangle$ .

Les états à une particule dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  sont donnés par :

$$\langle \vec{r} | q_k \rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)^2}{2a_k} \right) |\chi_k, \phi_k\rangle |m_t(k)\rangle \quad (\text{A.1})$$

avec  $|\chi_k(t), \phi_k(t)\rangle$  qui est le vecteur d'onde de spin 1/2 des particules dans l'espace des états de spin à deux dimensions défini par :

$$|\chi_k, \phi_k\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) e^{i\phi_k} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

où  $\chi_k(t)$  et  $\phi_k(t)$  sont les deux phases dépendantes du temps qui décrivent l'évolution dynamique du spin dans cette espace. Le ket  $|m_t(k)\rangle$  représente le degré de liberté lié à l'isospin. Il vient ensuite les expressions des dérivées premières dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  :

$$\left\langle \vec{r} \left| \frac{\partial q_k}{\partial a_k} \right. \right\rangle = \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)^2}{2a_k^2} \langle \vec{r} | q_k \rangle \quad (\text{A.3})$$

$$\left\langle \vec{r} \left| \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k} \right. \right\rangle = \frac{\vec{r} - \vec{b}_k}{a_k} \langle \vec{r} | q_k \rangle \quad (\text{A.4})$$

$$\left\langle \vec{r} \left| \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \right. \right\rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)^2}{2a_k} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ i \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) e^{i\phi_k} \end{pmatrix} |m_t(k)\rangle \quad (\text{A.5})$$

$$\left\langle \vec{r} \left| \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \right. \right\rangle = \exp \left( -\frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)^2}{2a_k} \right) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \\ \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) e^{i\phi_k} \end{pmatrix} |m_t(k)\rangle \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Matrice de recouvrement.

Les éléments de la matrice de recouvrement sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle q_k | q_l \rangle &= O_{kl}^{-1} \\ &= \left( 2\pi \frac{a_k^* a_l}{a_k^* + a_l} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{(\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)^2}{2(a_k^* + a_l)} \right) \langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle \langle m_t(k) | m_t(l) \rangle \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

avec

$$\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle = \cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \cos \left( \frac{\chi_l}{2} \right) + \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \quad (\text{A.8})$$

et l'on considérera qu'il n'y a pas de recouvrement entre deux particules d'espèce différente avec :

$$\langle m_t(k) | m_t(l) \rangle = 2 \left( \frac{1}{4} + m_k m_l \right), \quad m_t = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{pour les protons,} \\ -\frac{1}{2} & \text{pour les neutrons.} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

### A.3 Dérivées premières des éléments de la matrice de recouvrement.

Les dérivées premières des éléments de la matrice de recouvrement sont données par :

$$\left\langle q_k \left| \frac{\partial q_l}{\partial a_l} \right. \right\rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.10})$$

$$\left\langle q_k \left| \frac{\partial q_l}{\partial \vec{b}_l} \right. \right\rangle = \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.11})$$

$$\left\langle q_k \left| \frac{\partial q_l}{\partial \phi_l} \right. \right\rangle = i \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \left\langle q_k \left| \frac{\partial q_l}{\partial \chi_l} \right. \right\rangle &= \frac{1}{2} \left( -\cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) + \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \cos \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

où chacun de ces éléments respecte la condition suivante :

$$\left\langle \frac{\partial q_l}{\partial r_\lambda^*} \middle| q_k \right\rangle = \left( \left\langle q_k \left| \frac{\partial q_l}{\partial r_\lambda} \right. \right\rangle \right)^* \quad (\text{A.14})$$

## A.4 Dérivées secondes des éléments de la matrice de recouvrement.

Les dérivées secondes des éléments de la matrice de recouvrement sont données par :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial a_l} \right\rangle &= \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{3}{a_k^*} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \left( \frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{a_k^* + a_l} \left( \frac{1}{2} \frac{3}{a_k^* + a_l} - \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right] \langle q_k | q_l \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_{ki}^*} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \vec{b}_{lj}} \right\rangle = \left( \frac{\delta_{ij}}{a_k^* + a_l} - \frac{(b_{ki}^* - b_{li})(b_{kj}^* - b_{lj})}{(a_k^* + a_l)^2} \right) \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.16})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \vec{b}_l} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \left( \frac{3}{a_k^*} - \frac{5}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.17})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \phi_l} \right\rangle = \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \chi_l} \right\rangle &= \frac{1}{4} \left( -\sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) + \cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \cos \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \phi_l} \right\rangle = \frac{i}{2} \cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.20})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \vec{b}_l} \right\rangle = -i \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial \vec{b}_l} \right\rangle &= \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \frac{1}{2} \left( -\sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \cos \left( \frac{\chi_l}{2} \right) + \cos \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial a_l} \right\rangle &= -\frac{i}{2} \left( \frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \sin \left( \frac{\chi_k}{2} \right) \sin \left( \frac{\chi_l}{2} \right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial a_l} \right\rangle &= \left( -\sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\chi_l}{2}\right) + \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\
&\times \frac{1}{4} \left( \frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

où chacun de ces éléments respecte la condition suivante :

$$\left\langle \frac{\partial q_l}{\partial r_\lambda^*} \middle| \frac{\partial q_k}{\partial r_\kappa} \right\rangle = \left( \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial r_\kappa^*} \middle| \frac{\partial q_l}{\partial r_\lambda} \right\rangle \right)^* \tag{A.25}$$

## A.5 Energie cinetique.

Les éléments de la matrice à un corps de l'énergie cinétique sont définis par :

$$\begin{aligned}
\langle q_k | \hat{t} | q_l \rangle &= \left\langle q_k \middle| \frac{\hat{p}^2}{2m} \middle| q_l \right\rangle \\
&= \frac{(\hbar c)^2}{2mc^2} \left( \frac{3}{a_k^* + a_l} - \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle
\end{aligned} \tag{A.26}$$

et leurs dérivées premières sont données par :

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k^*} \middle| \hat{t} \middle| q_l \right\rangle = -\frac{(\hbar c)^2}{2mc^2} \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \left( \frac{5}{a_k^* + a_l} - \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle \tag{A.27}$$

$$\tag{A.28}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| \hat{t} \middle| q_l \right\rangle &= \frac{(\hbar c)^2}{4mc^2} \left[ \frac{3}{a_k^* + a_l} \left( \frac{3}{a_k^*} - \frac{5}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \left( \frac{3}{a_k^*} - \frac{7}{a_k^* + a_l} + \left( \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right] \langle q_k | q_l \rangle
\end{aligned} \tag{A.29}$$

$$\tag{A.30}$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \hat{t} \middle| q_l \right\rangle = -i \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | \hat{t} | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \tag{A.31}$$

$$\tag{A.32}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \hat{t} \middle| q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left( -\sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\chi_l}{2}\right) + \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\
&\times \frac{\langle q_k | \hat{t} | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}
\end{aligned} \tag{A.33}$$



## A.6 Oscillateur harmonique.

Les éléments de la matrice à un corps de l'énergie harmonique sont définis par :

$$\langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle = \left( 3G_{kl} + \vec{B}_{kl}^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.34})$$

et en définissant les quantités :

$$G_{kl} = \frac{a_k^* a_l}{a_k^* + a_l} \quad (\text{A.35})$$

et

$$\vec{B}_{kl} = \frac{a_l \vec{b}_k^* + a_k^* \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \quad (\text{A.36})$$

ainsi que leurs dérivées :

$$\frac{\partial G_{kl}}{\partial a_k^*} = \frac{a_l^2}{a_k^* + a_l} \quad (\text{A.37})$$

$$\frac{\partial G_{kl}}{\partial \vec{b}_k^*} = 0 \quad (\text{A.38})$$

$$\frac{\partial G_{kl}}{\partial \phi_k} = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$\frac{\partial G_{kl}}{\partial \chi_k} = 0 \quad (\text{A.40})$$

et

$$\frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial a_k^*} = -a_l \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{(a_k^* + a_l)^2} \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{\partial \vec{B}_{kli}}{\partial \vec{b}_{kj}^*} = \delta_{ij} \frac{a_l}{(a_k^* + a_l)} \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial \phi_k} = 0 \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial \chi_k} = 0 \quad (\text{A.44})$$

les expressions des dérivées premières sont données par :

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| \hat{r}^2 \middle| q_l \right\rangle = \left( 2\vec{B}_{kl} \cdot \frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial a_k^*} + 3G_{kl} \frac{\partial G_{kl}}{\partial a_k^*} \right) \langle q_k | q_l \rangle + \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| q_l \right\rangle \frac{\langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle}{\langle q_k | q_l \rangle} \quad (\text{A.45})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k^*} \middle| \hat{r}^2 \middle| q_l \right\rangle = 2\vec{B}_{kl} \cdot \frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial \vec{b}_k^*} \langle q_k | q_l \rangle + \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k^*} \middle| q_l \right\rangle \frac{\langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle}{\langle q_k | q_l \rangle} \quad (\text{A.46})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \hat{r}^2 \middle| q_l \right\rangle = -i \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.47})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \hat{r}^2 \middle| q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left( -\sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\chi_l}{2}\right) + \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | \hat{r}^2 | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

## A.7 Piège en $\vec{r}^4$ .

Les éléments de la matrice à un corps de l'énergie du piège en  $\vec{r}^4$  sont définis par :

$$\langle q_k | \hat{r}^4 | q_l \rangle = \left( 15G_{kl}^2 + \vec{B}_{kl}^4 + 18\vec{B}_{kl}^2 G_{kl} \right) \langle q_k | q_l \rangle \quad (\text{A.49})$$

et en utilisant les notations de la section précédente, les dérivées premières sont données par :

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k^*} \middle| \hat{r}^4 \middle| q_l \right\rangle = \langle q_k | q_l \rangle \left( 4\vec{B}_{kl} \cdot \frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial \vec{b}_k^*} \vec{B}_{kl}^2 + 36\vec{B}_{kl} \cdot \frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial \vec{b}_k^*} G_{kl} \right) + \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \vec{b}_k^*} \middle| q_l \right\rangle \frac{\langle q_k | \hat{r}^4 | q_l \rangle}{\langle q_k | q_l \rangle} \quad (\text{A.50})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| \hat{r}^4 \middle| q_l \right\rangle &= \langle q_k | q_l \rangle \left[ \vec{B}_{kl} \cdot \frac{\partial \vec{B}_{kl}}{\partial a_k^*} \left( 4\vec{B}_{kl}^2 + 36G_{kl}^2 \right) + G_{kl} \frac{\partial G_{kl}}{\partial a_k^*} \left( 30 + 18\vec{B}_{kl}^2 \right) \right] \\ &\quad + \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial a_k^*} \middle| q_l \right\rangle \frac{\langle q_k | \hat{r}^4 | q_l \rangle}{\langle q_k | q_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

$$\left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \phi_k} \middle| \hat{r}^4 \middle| q_l \right\rangle = -i \sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \frac{\langle q_k | \hat{r}^4 | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.52})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial q_k}{\partial \chi_k} \middle| \hat{r}^4 \middle| q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left( -\sin\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\chi_l}{2}\right) + \cos\left(\frac{\chi_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\chi_l}{2}\right) \exp(-i(\phi_k - \phi_l)) \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k | \hat{r}^4 | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

### A.8 Tenseur $A_{\mu\nu}$ .

Le tenseur  $A_{\mu\nu}$  pour un choix gaussien des états à une particule est donné par :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{\mu\nu} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\mu \partial q_\nu} - \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\nu \partial q_\mu} \\
 &= 2\hbar \text{Im} \left[ \left\langle \frac{\partial Q}{\partial q_\mu} \middle| \frac{\partial Q}{\partial q_\nu} \right\rangle \right] \\
 &= 2\hbar \text{Im} \left[ \left( \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| \frac{\partial q_n}{\partial q_\nu} \right\rangle - \sum_{r=1}^A \sum_{s=1}^A \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \middle| q_r \right\rangle O_{rs} \left\langle q_s \middle| \frac{\partial q_n}{\partial q_\nu} \right\rangle \right) O_{nm} \right] \quad (\text{A.54})
 \end{aligned}$$

## A.9 Expressions des densités locales et de leurs dérivées.

### A.9.1 Densité de particules.

La densité locale de particules dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  est donnée par :

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}) &= \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \hat{\rho} \right) \\ &= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \langle \vec{r} | q_k \rangle O_{kl} \langle q_l | \vec{r} \rangle \\ &= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \rho_{kl}(\vec{r}) O_{kl}\end{aligned}\tag{A.55}$$

où

$$\rho_{kl}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | q_k \rangle \langle q_l | \vec{r} \rangle\tag{A.56}$$

Il en découle ensuite l'expression de sa dérivée par rapport aux paramètres variationnels tel que :

$$\frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial q_\mu} = \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left[ \frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial q_\mu} O_{kl} + \rho_{kl}(\vec{r}) \frac{\partial O_{kl}}{\partial q_\mu} \right]\tag{A.57}$$

avec :

$$\frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial q_\mu} = \left\langle \vec{r} \left| \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \right. \right\rangle \langle q_l | \vec{r} \rangle + \langle \vec{r} | q_k \rangle \left\langle \frac{\partial q_m}{\partial q_\mu} \left| \vec{r} \right. \right\rangle\tag{A.58}$$

ainsi que l'expression de son gradient :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \rho(\vec{r}) &= i \sum_{i=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \left[ \hat{p}_i, \hat{\rho} \right] \right) \\ &= - \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left( \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} + \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \right) \rho_{kl}(\vec{r}) O_{kl}\end{aligned}\tag{A.59}$$

et de son Laplacien :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) &= i^2 \sum_{i=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \left[ \hat{p}_i \left[ \hat{p}_i, \hat{\rho} \right] \right] \right) \\ &= \sum_{i=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \left[ \hat{p}_i \hat{\rho} \hat{p}_i - (\hat{p}_i^2 \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{p}_i^2) \right] \right) \\ &= 2\tau(\vec{r}) + \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left( \left( \frac{\vec{r} - \vec{b}_k}{a_k} \right)^2 + \left( \frac{\vec{r} - \vec{b}_l^*}{a_l^*} \right)^2 - 3 \left( \frac{1}{a_k} + \frac{1}{a_l^*} \right) \right) \rho_{kl}(\vec{r}) O_{kl}\end{aligned}\tag{A.60}$$

### A.9.2 Densité d'énergie cinétique.

La densité locale d'énergie cinétique dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  est donnée par :

$$\begin{aligned}
\tau(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\hat{\vec{r}} - \vec{r}) \hat{p}_i \hat{\rho} \hat{p}_i \right) \\
&= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \langle \vec{r} | q_k \rangle O_{kl} \langle q_l | \vec{r} \rangle \\
&= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \tau_{kl}(\vec{r}) O_{kl}
\end{aligned} \tag{A.61}$$

avec

$$\tau_{kl}(\vec{r}) = \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \rho_{kl}(\vec{r}) \tag{A.62}$$

où  $\rho_{kl}(\vec{r})$  est défini par l'expression (A.58). Il en découle ensuite l'expression de sa dérivée par rapport aux paramètres variationnels tel que :

$$\frac{\partial \tau(\vec{r})}{\partial q_\mu} = \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left[ \frac{\partial \tau_{kl}(\vec{r})}{\partial q_\mu} O_{kl} + \tau_{kl}(\vec{r}) \frac{\partial O_{kl}}{\partial q_\mu} \right] \tag{A.63}$$

avec :

$$\frac{\partial \tau_{kl}(\vec{r})}{\partial a_l^*} = \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\vec{r} - \vec{b}_l^*}{a_l^*} \right)^2 - \frac{1}{a_l^*} \right] \tau_{kl}(\vec{r}) \tag{A.64}$$

$$\frac{\partial \tau_{kl}(\vec{r})}{\partial \vec{b}_l^*} = \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \tau_{kl}(\vec{r}) - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k a_l^*} \rho_{kl}(\vec{r}) \tag{A.65}$$

$$\frac{\partial \tau_{kl}(\vec{r})}{\partial \phi_l} = \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial \phi_l} \tag{A.66}$$

$$\frac{\partial \tau_{kl}(\vec{r})}{\partial \chi_l} = \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial \chi_l} \tag{A.67}$$

### A.9.3 Densité vectorielle $\vec{J}$ .

La densité vectorielle  $\vec{J}$  dans la représentation  $|\vec{r}\rangle$  est donnée par :

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \text{Tr} \left( \delta(\vec{r} - \vec{r}) \left\{ \hat{p}_i, \hat{\rho} \right\} \right) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left( \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \right) \rho_{kl}(\vec{r}) O_{kl} \\ &= \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \vec{j}_{kl}(\vec{r}) O_{kl}\end{aligned}\tag{A.68}$$

avec

$$\vec{j}_{kl}(\vec{r}) = \frac{i}{2} \left( \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \right) \rho_{kl}(\vec{r})\tag{A.69}$$

où  $\rho_{kl}(\vec{r})$  est défini par l'expression (A.58). Il en découle ensuite l'expression de ses dérivées par rapport aux paramètres variationnels tel que :

$$\frac{\partial \vec{J}(\vec{r})}{\partial q_\mu} = \sum_{k=1}^A \sum_{l=1}^A \left[ \frac{\partial \vec{j}_{kl}(\vec{r})}{\partial q_\mu} O_{kl} + \vec{j}_{kl}(\vec{r}) \frac{\partial O_{kl}}{\partial q_\mu} \right]\tag{A.70}$$

avec :

$$\frac{\partial \vec{j}_{kl}(\vec{r})}{\partial a_l^*} = \frac{i}{2} \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^{*2}} \rho_{kl}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\vec{r} - \vec{b}_l^*}{a_l^*} \right)^2 \vec{j}_{kl}(\vec{r})\tag{A.71}$$

$$\frac{\partial \vec{j}_{kl}(\vec{r})_i}{\partial b_{lj}^*} = \frac{i}{2} \frac{\delta_{ij}}{a_l^*} \rho_{kl}(\vec{r}) + \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)_j}{a_l^*} \vec{j}_{kl}(\vec{r})_i\tag{A.72}$$

$$\frac{\partial \vec{j}_{kl}(\vec{r})}{\partial \phi_l} = \frac{i}{2} \left( \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \right) \frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial \phi_l}\tag{A.73}$$

$$\frac{\partial \vec{j}_{kl}(\vec{r})}{\partial \chi_l} = \frac{i}{2} \left( \frac{(\vec{r} - \vec{b}_k)}{a_k} - \frac{(\vec{r} - \vec{b}_l^*)}{a_l^*} \right) \frac{\partial \rho_{kl}(\vec{r})}{\partial \chi_l}\tag{A.74}$$



# Bibliographie

- [1] L. Landau, Physik Zeits, Sowjetunion, 285 (1932).
- [2] N.K. Glendenning, *Compact Stars : Nuclear Physics, Particle Physics, and General Relativity*, Springer-Verlag (2000).
- [3] N.K. Glendenning, Phys. Rep. **342**, 393 (2001).
- [4] S.A. Colgate and R.H. White, Astroph. J. **143**, 626 (1966).
- [5] W. D. Arnett, Can. J. Phys. **44** 2553 (1966).
- [6] P. Blottiau, Ph. D. thesis, Paris VII University (1989).
- [7] J. Margueron *et al.*, Phys. Rev C **70**, 028801 (2004).
- [8] C. J. Horowitz, *et al.*, Phys. Rev C **70**, 065806 (2004).
- [9] C. J. Horowitz, *et al.*, Phys. Rev C **72**, 035801 (2005).
- [10] H. Sonoda *et al.*, Phys. Rev C **75**, 042801 (2007).
- [11] J. R. Oppenheimer and G. M. Volkoff, Phys. Rev. **55**, 374 (1939).
- [12] I. Bombaci, Astronomy and astrophysics **305**, 871 (1996).
- [13] D.P. Page *et al.*, Neutron star theory group at UNAM, [www.astroscu.unam.mx](http://www.astroscu.unam.mx).
- [14] T. Maruyama *et al.*, Phys. Rev C **72**, 015802 (2005).
- [15] D.G. Ravenhall, *et al.* Phys. Rev. Lett. **50**, 2066 (1983).
- [16] C.P. Lorenz, *et al.* Phys. Rev. Lett. **70**, 379 (1993).
- [17] D.G. Ravenhall and C.J. Pethick, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **45** 429 (1995).
- [18] G. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 031101 (2005).
- [19] H. Sonoda *et al.*, Phys. Rev C **77** 035806 (2008).
- [20] H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A 515** 147 (1990).
- [21] H. Feldmeier *et al.*, Nucl. Phys. **A 583** 347c-352c (1995).
- [22] H. Feldmeier *et al.*, Nucl. Phys. **A 586** 496-532 (1995).
- [23] G. Sauer *et al.*, Nucl. Phys. **A 264**, 221 (1976).
- [24] V. Flandrois, Ph. D. thesis, Université Caen Basse-Normandie (2001).
- [25] P. Bonche, S. Levit and D. Vautherin, Nucl. Phys. A **436**, 265 (1985).
- [26] Al.H. Raduta and Ad.R. Raduta, Nucl. Phys. A **703**, 876 (2002).
- [27] F. Gulminelli *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 202701 (2003).
- [28] Ph. Chomaz and F. Gulminelli, Lecture Notes in Physics vol.602, Springer (2002).
- [29] S.J. Lee and A.Z. Mekjian, Phys. Rev. C **63**, 044605 (2001).



- [30] M. P. Allen, D. J. Tildesley *Computer Simulation of liquids*, Clarendon, London (1987).
- [31] A.Y. Abdulnour and J.A. Board Jr, Computer Physics Communications **95** 73-92 (1996).
- [32] K.H.O. Hasnaoui *Transition de phase et frustration en physique nucléaire et astrophysique*, Rapport de Master de l'Université Claude Bernard Lyon I (2005).
- [33] M. Grousson *et al.*, Phys. Rev E **62**, 7781 (2000).
- [34] M. Grousson *et al.*, Phys. Rev E **64**, 036109 (2001).
- [35] F. Gulminelli *et al.*, Phys. Rev. E **68**, 026120 (2003).
- [36] N. Metropolis *et al.*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [37] M. LeBellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Intereditions/Edition du CNRS (1988).
- [38] K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin 1986), 2nd ed.
- [39] P. Napolitani, Ph. Chomaz, F. Gulminelli, and K.H.O. Hasnaoui, Phys. Rev. Lett. **98**, 131102 (2007).
- [40] C. Ducoin, K.H.O. Hasnaoui, P. Napolitani, Ph. Chomaz, and F. Gulminelli, and Phys. Rev. C **75**, 065805 (2007).
- [41] F. Gulminelli, Ann. Phys. Fr. **29** 1-121 (2004).
- [42] C. Dress and W. Krauth, J. Phys. A **28**, L597 (1995).
- [43] J.R. Heringa and H.W.J. Blöte, Phys. Rev. E **57**, 4976 (1998).
- [44] K. G. Wilson and J. Kogut, Phys. Rep. **12**, 75 (1974).
- [45] M. Laguës and A. Lesne, *Invariances d'échelle, Des changements d'états à la turbulence*, Éditions Belin (2003).
- [46] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, Phys. Rev. Lett. **31**, 1411 (1973).
- [47] T. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, Physica **71** 17-40 (1974).
- [48] Shih-chieh Hsu *et al.*, Phys. Rev. B **11**, 2699 (1975).
- [49] Aa. S. Sudbø and P. C. Hemmer, Phys. Rev. B **13**, 980 (1976).
- [50] K. Binder, Zeitschrift fur Physik B, 43 :119, 1981.
- [51] C. Ducoin, Ph. D. thesis, Université Caen Basse-Normandie (2006).
- [52] C. Ducoin *et al.*, Nucl. Phys. A **789**, 403 (2007).
- [53] C. Dorso *et al.*, Phys. Lett. B **188** 287-392 (1987).
- [54] C. Dorso *et al.*, Phys. Lett. B **215** 611-616 (1988).
- [55] D. Cussol, Phys. Rev C **68**, 014602 (2003).
- [56] J. Aichelin, Phys. Reports **202** 233 (1991).
- [57] P. Ring, P. Schuck *The nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag Berlin (1980).
- [58] S.E. Koonin *et al.*, Phys. Rev C **15**, 1359 (1977).
- [59] P. Bonche *et al.*, Phys. Rev C **17**, 1700 (1978).
- [60] R.Y. Cusson *et al.*, Phys. Rev C **18**, 2589 (1994).

- [61] K.T.R. Davis *et al.*, Phys. Rev C **18**, 2631 (1978).
- [62] A.S. Umar *et al.*, Phys. Rev C **73**, 054607 (2006).
- [63] J.A. Maruhn *et al.*, Phys. Rev C **74**, 027601 (2006).
- [64] S. Ayik *et al.*, Phys. Lett. **B 212**, 269 (1988).
- [65] S. Ayik *et al.*, Nucl. Phys. **A 513**, 187 (1990).
- [66] J. Randrup *et al.*, Nucl. Phys. **A 514**, 339 (1990).
- [67] S. Drożdż *et al.*, Phys. Lett. **B 109** 145 (1982).
- [68] B. Caurier *et al.*, Phys. Lett. **B 109** 150 (1982).
- [69] A. Ono *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68** 2898 (1991).
- [70] A. Ono *et al.*, Prog. Theor. Phys. **87** 1185 (1992).
- [71] H. Feldmeier *et al.*, Prog. Part. Nucl. Phys. **39** 393-442 (1997).
- [72] H. Feldmeier *et al.*, Rev. Mod. Phys. **72** 655 (2000).
- [73] J. Schnack *et al.*, Nucl. Phys. **A 601** 181-194 (1996).
- [74] J. Schnack *et al.*, Phys. Lett. **B 409** 1-10 (1997).
- [75] T. Neff *et al.*, Nucl. Phys. **A 738** 357-361 (2004).
- [76] A. Ono *et al.*, Phys. Rev C **48**, 2946 (1994).
- [77] A. Ono *et al.*, Phys. Rev C **53**, 845 (1996).
- [78] A. Ono *et al.*, Phys. Rev C **53**, 2958 (1996).
- [79] A. Ono, Phys. Rev C **59**, 853 (1999).
- [80] A. Ono *et al.*, Phys. Rev C **66**, 014603 (2002).
- [81] A. Ono *et al.*, Prog. Part. Nucl. Phys. **53**, 501-581 (2004).
- [82] J. Dechargé *et al.*, Phys. Rev. C **21**, 1568 (1980).
- [83] J.F. Berger *et al.*, Nucl. Phys. **A 502**, 85c (1989).
- [84] T.H.R. Skyrme, Phil. Mag. **1**, 1043 (1956).
- [85] T.H.R. Skyrme, Nucl.Phys. **9**, 615 (1959).
- [86] D. Vautherin, D.M. Brink, Phys. Rev C **5**, 626 (1972).
- [87] M. Beiner *et al.*, Nucl.Phys. **A 238**, 29 (1975).
- [88] N. Van Giai *et al.*, Phys. Lett. **B 106** 379 (1981).
- [89] J. Dobaczewski *et al.*, Phys. Rev C **52**, 1827 (1995).
- [90] J. Dobaczewski *et al.*, Phys. Rev C **55**, 3177 (1997).
- [91] J. Dobaczewski *et al.*, Phys. Rev C **62**, 014310 (2000).
- [92] J. Dobaczewski *et al.*, Acta Phys. Pol. **B 27**, 45 (1996).
- [93] E. Chabanat *et al.*, Nucl. Phys. **A 627**, 710 (1997).
- [94] E. Chabanat *et al.*, Nucl. Phys. **A 635**, 231 (1998).
- [95] E. Chabanat *et al.*, Nucl. Phys. **A 643**, 441 (1998).
- [96] M. Bender *et al.*, Rev.Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [97] J. Meyer, Annales de Physique. Fr.28. N°3. 2003.
- [98] E. Perlinska *et al.*, Phys. Rev C **69**, 014316 (2004).

- [99] T. Lesinski *et al.*, Phys. Rev C **76**, 014312 (2007).
- [100] M. Bender *et al.*, Eur. Phys. J. **A 7**, 467 (2000).
- [101] K. Kim *et al.*, J. Phys. G : Nucl. Part. Phys. **23**, 1267 (1997).
- [102] C. Simenel *et al.*, Cours de l'école Joliot-Curie (2007).
- [103] J.-P. Blaizot, Phys. Rep. **64**, 171 (1980).
- [104] Ph. Chomaz, K.H.O. Hasnaoui, and F. Gulminelli, *From energy-density functionals to mean field potentials : a systematic derivation*, arXiv :nucl-th/0610027.
- [105] Y.M. Engel *et al.*, Nucl. Phys. **A 249**, 215 (1975).
- [106] J.C. Slater, Phys. Rev **81**, 385 (1951).
- [107] M.J. Giannoni *et al.*, Phys. Rev C **21**, 2076 (1980).
- [108] L. Bonneau, Phys. Rev C **74**, 014301 (2006).
- [109] W.H. Press *et al.*, *Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press (2007).
- [110] J.P. Nougier, *Methodes de calcul numerique*, Hermes Sciences Publicat (2001).
- [111] Y. Kanada-En'yo *et al.*, Phys. Rev C **69**, 034306 (2004).
- [112] Y. Kanada-En'yo *et al.*, Nucl. Phys. **A 734** 341-344 (2004).
- [113] Y. Kanada-En'yo *et al.*, Phys. Rev C **72**, 064322 (2005).
- [114] Ph. Chomaz and N. Frascaria, Phys. Reports **252** 275 (1995).
- [115] B. Avez and C. Simenel, Private communication.
- [116] K. Bennaceur and J. Dobaczewski, Phys. Commun. **168** 96-122 (2005).
- [117] G. Audi and A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A 594** 409-480 (1995).
- [118] N. Marty *et al.*, Orsay Repport IPNO76-03 (1976).
- [119] D.H. Youngblood *et al.*, Phys. Rev. Lett. **39** 1188 (1977).
- [120] J-P. Blaizot, Phys. Reports **64** 171 (1980).
- [121] G. Coló Youngblood *et al.*, Phys. Rev C **70**, 024307 (2004).
- [122] C. Monrozeau, Ph. D. thesis, Paris XI University (2007).
- [123] D.H. Youngblood *et al.*, Phys. Rev C **57**, 2748 (1998).
- [124] D.H. Youngblood *et al.*, Phys. Rev C **68**, 014305 (2003).
- [125] C. Leclerc, Mémoire de Master, Université de Caen Basse-Normandie (2008).
- [126] S. Nosé, J. Chem. Phys. **81**, 1 (1984).
- [127] W.G. Hoover, Phys. Rev A **31**, 1695 (1985).
- [128] W.G. Hoover, *Molecular Dynamics*, Springer-Verlag (1986).
- [129] H.A. Posh *et al.*, Phys. Rev A **33**, 4253 (1986).
- [130] W.G. Hoover, Phys. Rev A **40**, 2814 (1989).
- [131] A.C. Brańka *et al.*, Phys. Rev E **62**, 2814 (2000).
- [132] F. Legoll *et al.*, arXiv :math/0511178, (2006).
- [133] M.J. Ison *et al.*, Phys. Rev E **76**, 051120 (2007).
- [134] A. Caldeira *et al.*, Phys. Rev. Lett. **46** 211 (1981).

- [135] A. Legget *et al.*, Rev. Mod. Phys. **59** 1 (1987).
- [136] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific (1992).
- [137] J. Dalibard, *Cours de l'école polytechnique*, (2005).
- [138] T. Holstein and T. Primakoff, Phys. Rev **58**, 1098 (1940).
- [139] G.D. Birkhoff, Proceedings of the National Academy of Sciences USA **17** 656-660 (1931).
- [140] C. Gignoux *et al.*, *Mécanique de la formulation Lagrangienne au chaos Hamiltonien*, EDP Sciences (2002).
- [141] P. Bergé *et al.*, *L'ordre dans le chaos*, Herman (1988).
- [142] L. Arnold *et al.*, *Lyapunov Exponents*, Springer-Verlag (1990).
- [143] E.M. Bolt *et al.*, Phys. Lett. **A204** 373-378 (1995).
- [144] L.A. Caron *et al.*, J.Phys A **37**, 6251-6265 (2004).
- [145] V. Lopac *et al.*, Physica D **217**, 88-101 (2006).
- [146] R. U. Haq *et al.*, Phys. Rev. Lett. **48**, 1086 (1982).
- [147] O. Bohigas *et al.*, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [148] F. Gulminelli, Habilitation à diriger des recherches, Université de Caen Basse-Normandie (2003).
- [149] T. Furuta *et al.*, Phys.Rev. C **74** 014612 (2006).
- [150] T. Furuta, Ph. D. thesis, Tohoku University (2007).
- [151] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, J. Whyley and Sons Edition (1986).
- [152] N. Chamel, Ph. D. thesis, UPMC University (2004).



**Résumé** : Cette thèse se propose d'étudier la thermodynamique de la matière nucléaire qui constitue l'écorce des proto-étoiles et étoiles à neutrons. Une connaissance détaillée des propriétés thermodynamiques de la matière d'étoile est nécessaire afin d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques impliqués dans le refroidissement des proto-étoiles, et dans la formation de supernovae de type II. L'un des objectifs fondamentaux est d'extraire le diagramme des phases de la matière d'étoile afin de déterminer si celui-ci présente des instabilités et/ou des points critiques. Le travail présenté ici se divise en deux parties, une première portant sur des approches classiques, et une seconde sur une approche quantique. Les approches classiques sont basées sur le modèle d'Ising et le groupe de renormalisation. Elles vont nous permettre d'obtenir des informations qualitatives sur la phénoménologie des transitions de phase de la matière d'étoile, et de discuter l'influence de la frustration Coulombienne sur le diagramme des phases. L'approche quantique est basée sur un modèle de dynamique moléculaire fermionique que nous avons dérivé à partir du formalisme de la fonctionnelle de la densité, et implémenté numériquement avec des forces de Skyrme optimisées pour la matière riche en neutrons. Le travail de cette thèse montre des premières applications à l'étude thermodynamique de systèmes finis, et à des calculs de structure nucléaire pour des noyaux légers. Nous proposerons également une ébauche du formalisme qui permettra à terme de traiter numériquement le problème quantique de la matière infinie d'étoile à l'aide du modèle de dynamique moléculaire.

**Title** : Phase transition and frustration in nuclear physics and astrophysics

**Abstract** : The thermodynamics of nuclear matter which constitutes the crust of proto-neutron stars and neutron stars is studied in this thesis. Obtaining information on the star matter thermodynamics will enhance the understanding of physical phenomena involved in the cooling of proto-neutron stars, and in the formation of type II supernovae. One of the main goals is to extract the star-matter phase diagram in order to determine if instabilities and/or critical points are present. The work is divided into two parts : in the first one classical approaches are developed, while the second one presents a quantum approach. The classical approaches are based on the Ising model and on the renormalisation group. They give us qualitative information on the phenomenology of phase transitions for star matter, and allow a discussion on the properties of the phase diagram under the generic phenomenon of Coulomb frustration. The quantum approach is based on a fermionic molecular dynamics model that we have developed from the density functional formalism, and numerically implemented using Skyrme forces optimized on neutron rich nuclei and neutron matter. This thesis work shows some first applications to the study the thermodynamics of finite nuclear systems, as well as nuclear structure calculations for light nuclei. A new formalism based on the molecular dynamics model is sketched which will ultimately allow treating the numerical quantum problem for the infinite star matter.

**Mots-clefs** : Etoiles à neutrons – Transitions de phases – Frustration (physique) – Ising, modèle d' – Groupe de renormalisation – Problème des N corps – Dynamique moléculaire – Hartree-Fock, méthode d'approximation.

**Discipline** : Constituants élémentaires et physique théorique